

**ELEKTRONENEINFANG IN LANGSAMEN STÖßEN
MEHRFACH GELADENER IONEN MIT ATOMEN:
WINKELVERTEILUNG UND MEHR-ELEKTRONEN-PROZESSE**

Dissertation zur Erlangung des Grades
eines Doktors der Naturwissenschaften
der Fakultät für Physik und Astronomie
an der Ruhr-Universität Bochum

von
Hans Rudolf Koslowski
aus Homburg

Bochum 1988



**ELEKTRONENEINFANG IN LANGSAMEN STÖßEN
MEHRFACH GELADENER IONEN MIT ATOMEN:
WINKELVERTEILUNG UND MEHR-ELEKTRONEN-PROZESSE**

Dissertation zur Erlangung des Grades
eines Doktors der Naturwissenschaften
der Fakultät für Physik und Astronomie
an der Ruhr-Universität Bochum

von

Hans Rudolf Koslowski
aus Homberg

Bochum 1988

VERGLEICHENDE STUDIEN ZUR
KONSTITUTION DER
KLEINEN LOKALEN DER
KLEINEN LOKALEN DER
KLEINEN LOKALEN DER

DISSENTATION ZUR ERLANGUNG DES
DOKTORS DER PHILOSOPHIE
DIE ERGEBNISSE DER
FORSCHUNG ZUR
AN DER UNIVERSITÄT

VERGLEICHENDE STUDIEN
ZUR KONSTITUTION
DER KLEINEN LOKALEN
DER KLEINEN LOKALEN
DER KLEINEN LOKALEN

Dissertation eingereicht am 30.12.1988

Tag der mündlichen Prüfung 01.02.1989

Referent: Prof. Dr. B.A.Huber

Korreferent: Prof. Dr. P.H.Heckmann

Erstausgabe 1988

INHALT

I.	EINLEITUNG	1
II.	THEORIE	5
1.	Allgemeine Beschreibung: Kinematik, Kopplung, Auswahlregeln	5
2.	Klassische Beschreibung umladender Stöße	11
2.1.	Erweiterung auf den Mehr-Elektroneneinfang	12
2.2.	Niehaus-Modell	13
3.	Landau-Zener-Modell und Erweiterungen	18
3.1.	Reaktionsfenster nach Kimura et al.	20
3.2.	Taulbjerg-Faktor	23
3.3.	Multi-Channel-Landau-Zener Rechnungen	24
3.4.	Erweiterte MCLZ-Rechnungen: Berücksichtigung mehrerer Eingangskanäle und empirischer diabatischer Faktor	26
3.5.	Der Zwei-Elektroneneinfang im Modell der Potentialkurvenkreuzungen	30
3.6.	Kopplungsstärke für den Zwei-Elektroneneinfang	32
4.	Differentielle Wirkungsquerschnitte umladender Stöße	34
4.1.	Klassische Ablenkfunktion	36
4.2.	Klassische und semiklassische differentielle Wirkungsquerschnitte	38
III.	EXPERIMENT	40
1.	Prinzip der Translationsenergie-Spektroskopie	43
2.	Winkelaufgelöste Messung von Translationsenergiespektren	45
2.1	Datenerfassung und Steuerung des Experiments	47
3.	Testmessungen	49
4.	Gegenfeldanalysator	53
IV.	WINKELVERTEILUNG	57
1.	Zustandsselektive differentielle Wirkungsquerschnitte für den Ein-Elektroneneinfang in Ar^{2+}/He -Stößen	57
2.	Zwei-Elektroneneinfang	69
2.1.	Simultaner Einfang und Stufenprozeß in Ar^{4+}/Kr -Stößen	70
2.2.	Ar^{4+}/Ar : Zwei-Elektroneneinfang durch den Stufenprozeß	80
2.3.	Diskussion und Vergleich der beiden untersuchten Systeme	84

V.	ZWEI-ELEKTRONEN-PROZESSE BEIM EIN-ELEKTRONENEINFANG	91
1.	Ein-Elektroneneinfang in Ar^{3+}/Ar -Stößen: Test der erweiterten MCLZ-Rechnungen	91
2.	Ne^{3+}/He , Ein-Elektroneneinfang mit Projektilanregung: Energieabhängigkeit der partiellen Wirkungsquerschnitte	97
3.	Elektroneneinfang mit Projektilanregung in Ar^{3+}/Ne -Stößen: Reduzierung der Kopplungsstärke	104
VI.	ZUSAMMENFASSUNG	107
	ANHANG	110
A.	Messung totaler Wirkungsquerschnitte von Umladungsreaktionen	110
B.	Nachweiswahrscheinlichkeit eines Channeltrons für neutrale Teilchen	113
	REFERENZEN	116

I. EINLEITUNG

Die Untersuchung von Ion-Atom Stößen ist seit langem ein zentrales Thema der Atomphysik. Mit derartigen Experimenten lassen sich unterschiedliche Fragestellungen bezüglich der Struktur der stoßenden Teilchen und der Wechselwirkung miteinander behandeln. Neben der elastischen Streuung treten in solchen Stößen inelastische Prozesse auf. Dies sind z.B. die Anregung elektronischer Zustände des Projektilions, die Ionisierung des Targetatoms oder der Einfang von Elektronen in das Projektilion.

Elektroneneinfang-Reaktionen (oder auch Umladungsreaktionen) werden dadurch charakterisiert, daß ein oder mehrere Elektronen des Targetatoms während des Stoßes zum Projektil übergehen, das nach dem Stoß eine verringerte Ladung besitzt. Die eingefangenen Elektronen befinden sich im allgemeinen nicht im Grundzustand des Projektilions, sondern besetzen angeregte Zustände. Diese zerfallen über Photonenemission, bzw. beim Einfang mehrerer Elektronen auch durch die Emission von Elektronen (Augerübergänge).

Der Elektroneneinfang ist für mehrere Bereiche der Physik von Bedeutung. Der Einfang von Elektronen in angeregte Zustände mit anschließendem optischen Zerfall stellt einen Verlustprozeß in der Energiebilanz von Plasmen dar. Die Kenntnis totaler Wirkungsquerschnitte für den Elektroneneinfang ist wichtig, um bei Fusionsplasmen die maximal zulässigen Verunreinigungsraten (z.B. durch Wandatome) zu bestimmen, da die Emission von Photonen einen Verlust an Energie darstellt (de Heer 1980). Die Bedeutung von Umladungsprozessen für die Plasmadiagnostik wird z.B. von Donné und de Heer (1987) diskutiert. In umladenden Stößen werden bestimmte Energieniveaus des Projektils sehr selektiv besetzt. So sind Stoßsysteme denkbar, bei denen hierdurch eine Besetzungsinversion herbeigeführt werden kann. Falls Ionenstrahlen ausreichender Intensität verwendet werden (z.B. mit Ionenquellen wie ECRIS oder EBIS), läßt sich möglicherweise ein Laser im VUV realisieren (Anderson et al. 1976). Schließlich hat die Untersuchung von Umladungsprozessen große Bedeutung für die atomphysikalische Grundlagenforschung. Im allgemeinen Fall

handelt es sich bei der theoretischen Beschreibung von umladenden Stößen um ein Mehrkörperproblem, dessen quantenmechanische Behandlung sehr schwierig ist. So gibt es einfache Modelle, die auf einer klassischen oder halbklassischen Betrachtung des Stoßprozesses beruhen.

Eine sehr erfolgreiche Beschreibung des Elektroneneinfangs ist das sogenannte "Klassische Modell" (Bohr und Lindhard 1954, Ryufuku et al. 1980, Mann et al. 1981). Hier wird der Übergang des Elektrons auf einer klassisch erlaubten Bahn über die Potentialbarriere zwischen Ion und Atom angenommen. Aus dem Kernabstand, bei dem die Potentialbarriere gerade genügend abgesenkt ist, ergibt sich im klassischen Bild der Wirkungsquerschnitt für die Reaktion. Desweiteren läßt sich mit diesem Modell die Hauptquantenzahl des Niveaus, in welches das Elektron eingefangen wird, bestimmen. Die Energietönung einer Elektroneneinfangreaktion ist die Differenz der inneren oder kinetischen Energie des Systems vor und nach dem Stoß. Das klassische Modell erlaubt ebenfalls eine Vorhersage für die Energietönung der Reaktion.

Verschiedene Erweiterungen des Modells (Barany et al. 1985, Niehaus 1986) beschreiben den Einfang mehrerer Elektronen. Die experimentellen Untersuchungen zeigen, daß die Reaktionen dann große Wirkungsquerschnitte aufweisen, wenn deren Energiedefekte (= Gewinne an kinetischer Energie der Stoßpartner) in einem bestimmten Bereich liegen. Dieser Bereich von Energiedefekten wird Reaktionsfenster genannt. Das klassische Modell nach Niehaus erlaubt die Berechnung des Reaktionsfensters.

Eine weitere Beschreibung, das Modell der Potentialkurvenkreuzungen, nimmt an, daß der Einfang des Elektrons an der Kreuzung der Potentialkurven des einlaufenden Zustands und des Endzustands auftritt. Die Wahrscheinlichkeit hierfür wird aus der Landau-Zener Wahrscheinlichkeit (Landau 1932, Zener 1932) für das Verbleiben des Systems auf der ursprünglichen Potentialkurve bestimmt. Der Energiedefekt ist durch den asymptotischen Abstand der Potentialkurven festgelegt. Bei bekannten Potentialkurven

kann daher der Energiedefekt aus dem Kernabstand der Kurvenkreuzung bestimmt werden. Durch Variation der Kurvenkreuzung kann auch in diesem Modell ein Reaktionsfenster bestimmt werden (Kimura et al. 1984).

Vergleiche zwischen diesen einfachen Modellen und Experimenten zeigen erstaunlich genaue Vorhersagen bezüglich der Wirkungsquerschnitte und der Lage des Reaktionsfensters. Es gibt allerdings Fälle, in denen signifikante Abweichungen zwischen den Vorhersagen dieser Modelle und den experimentellen Ergebnissen auftreten. Im Rahmen dieser Arbeit wird gezeigt, daß es sich in ausgesuchten Fällen um Reaktionen handelt, bei denen außer dem transferierten Elektron noch ein weiteres Elektron beteiligt ist.

Die Untersuchung der zustandsselektiven Wirkungsquerschnitte (d.h. die Wirkungsquerschnitte für den Einfang des Elektrons in einen bestimmten elektronischen Zustand des Projektils) wird häufig mit der sogenannten Translationsenergie-Spektroskopie durchgeführt. Hierbei wird der Energiegewinn (oder -verlust) des Projektilions nach dem Stoß gemessen. Diese Methode erlaubt aufgrund der Stoßkinematik eine Identifizierung der Endzustände. Die Messungen der Energiegewinnspektren werden normalerweise in der Geradeausrichtung durchgeführt, da bei Umladungsprozessen streifende Stöße am meisten zum Elektroneneinfang beitragen, und für die kinematische Bestimmung des Stoßprozesses die Kenntnis des Streuwinkels notwendig ist. Desweiteren wird die Winkelakzeptanz des Detektorsystems möglichst klein gehalten, um Energieverschmierungen durch Messung unter verschiedenen Streuwinkeln zu vermeiden und dadurch die Energieauflösung dieser Experimente zu steigern. Andersson und Barany (1987) konnten zeigen, daß mehrere Peaks in einem Energiegewinnspektrum von Ar^{5+} -Ionen, welche in einem He-Target ein Elektron eingefangen haben (Hvelplund und Pederson 1987), ihre Ursache in der zu großen Winkelakzeptanz der Messung haben und nicht durch zusätzliche Reaktionskanäle hervorgerufen werden. Für die genaue Bestimmung der relativen Intensitäten (Wirkungsquerschnitte) der einzelnen Reaktionskanäle ist eine winkelabhängige Messung mit anschließender Integration über den Winkel notwendig, da das

Maximum im differentiellen Wirkungsquerschnitt eines Reaktionskanals deutlich von der 0° -Richtung abweichen kann.

Aktuelle Untersuchungen beschäftigen sich mit dem Einfang von zwei Elektronen. Im Bild der Potentialkurvenkreuzungen gibt es zwei prinzipielle Möglichkeiten, die beiden Elektronen zu übertragen. Zum einen können beide Elektronen am Kreuzungspunkt der einlaufenden Potentialkurve mit derjenigen, welche dem doppelten Elektroneneinfang entspricht, eingefangen werden. Dieses ist der sogenannte direkte oder simultane Prozeß. Die zweite Möglichkeit ist, daß erst der Einfang eines Elektrons erfolgt; das System wechselt auf die entsprechende Potentialkurve und an der Kreuzung mit der Potentialkurve des Zwei-Elektroneneinfangs wird ein zweites Elektron transferiert. Dieser Mechanismus des Zwei-Elektroneneinfangs wird Stufenprozeß genannt. Es ist eine aktuelle Fragestellung innerhalb der Untersuchung von Umladungsreaktionen, welcher dieser beiden möglichen Mechanismen zum Einfang von zwei Elektronen den Hauptbeitrag liefert (Roncin et al. 1986, Stolterfoht et al. 1986, Mann und Schulte 1987). Beide Prozesse lassen sich nicht durch die Messung des Energiegewinns der Reaktion unterscheiden, da sie zum gleichen Endzustand führen. Jedoch ist die Winkelverteilung der gestreuten Projektionen für beide Mechanismen unterschiedlich, so daß die Messung streuwinkeldifferentieller Wirkungsquerschnitte hilft, diese Frage zu beantworten.

II. THEORIE

II.1. Allgemeine Beschreibung: Kinematik, Kopplung, Auswahlregeln

Der Elektroneneinfang in Stößen mehrfach geladener Ionen mit Atomen wird durch die Reaktionsgleichung



beschrieben. Das q -fach geladene Ion A^{q+} stößt mit einem Atom B , im Stoß werden m Elektronen von B nach A übertragen, die meist ein angeregtes Niveau von $A^{(q-m)+}$ besetzen. Nach dem Stoß ist das Target m -fach ionisiert. Die Ladungszahl des Projektilions ist entsprechend um m verringert. Die Größe ΔE gibt den Energiedefekt der Umladungsreaktion an. Durch den Einfang der Elektronen in das Ion A^{q+} gewinnt das molekulare System die Rekombinationsenergie bezüglich des angeregten Zustands im Ion $A^{(q-m)+}$, dafür muß die Ionisierungsenergie für B aufgewendet werden. Elektroneneinfang-Reaktionen laufen bevorzugt dann ab, wenn die Reaktion exotherm ist ($\Delta E > 0$), d.h. das System gewinnt kinetische Energie.

Die Betrachtung über die Kinematik der umladenden Stöße berücksichtigt nur die asymptotischen Zustände des Systems. Für eine Beschreibung des Stoßprozesses selbst, stellt die Relativgeschwindigkeit v der beiden Teilchen einen wichtigen Parameter dar. Anhand der Relativgeschwindigkeit muß zwischen den unterschiedlichen Arten der Beschreibung unterschieden werden. Die in dieser Arbeit behandelten langsamen Stöße zeichnen sich dadurch aus, daß die Bahngeschwindigkeit v_0 der beteiligten Elektronen groß ist, im Vergleich zur relativen Geschwindigkeit v der beiden Kerne,

$$v \ll v_0. \quad (2.2)$$

In diesem Fall erfolgt die Annäherung beider Teilchen so langsam, daß die Elektronen sich bei jedem Kernabstand umorientieren können. Der Elektronenhülle bleibt genügend Zeit, sich dem



veränderten Feld anzupassen, so daß das System als Molekül betrachtet werden kann. Der Elektroneneinfang ist daher ein Übergang zwischen verschiedenen molekularen Zuständen.

Der andere Grenzfall, $v \gg v_0$, beschreibt ein System, in dem die Elektronen nicht genug Zeit haben, sich an den veränderten Kernabstand anzupassen. In diesem Fall ist die Beschreibung des stoßenden Systems mit atomaren Wellenfunktionen innerhalb einer Störungstheorie möglich, oder auch eine klassische Betrachtungsweise (z.B. die sogenannten "Classical Trajectory Monte Carlo"-Rechnungen von Olson und Salop, 1977) kann angewandt werden.

Die quantenmechanische Beschreibung der molekularen Zustände im Fall kleiner Relativgeschwindigkeit der Kerne erlaubt eine Trennung des Hamiltonoperators H in einen elektronischen und einen die Kernbewegung beschreibenden Teil:

$$H = H_{e1} + T_R. \quad (2.3)$$

Hier ist T_R der Operator der Kernbewegung

$$T_R = -\hbar^2 / 2\mu \nabla_R^2 \quad (2.4)$$

(μ = reduzierte Masse, R ist die relative Kernkoordinate) und der elektronische Hamiltonoperator beschreibt alle N Elektronen des Systems:

$$H_{e1} = \sum_i (-\hbar^2 / 2m_e \nabla_i^2 - \alpha Z_A / r_{iA} - \alpha Z_B / r_{iB} + \sum_{j \neq i} \alpha / r_{ij}) + \alpha Z_A Z_B / R + H_{mag} \quad (2.5)$$

(mit der Abkürzung $\alpha := e^2 / 4\pi\epsilon_0$). In der Gleichung bedeutet m_e die Elektronenmasse, r_{iA} , r_{iB} und r_{ij} sind die Koordinaten des i -ten Elektrons bezüglich der Kerne A und B und des j -ten Elektrons; Z_A und Z_B sind die Ladungen der Kerne A und B. Die magnetische Wechselwirkung der Elektronen ist im Operator H_{mag} zusammengefaßt. Für dieses System ist nun die zeitunabhängige Schrödingergleichung

$$H \Psi = E_{ges} \Psi \quad (2.6)$$

(E_{ges} ist die Gesamtenergie des Systems aus den Kernen A und B und den N Elektronen) zu lösen. Die Gesamtwellenfunktion Ψ_{ges} des im Stoß gebildeten Moleküls läßt sich als Produktansatz einer Kernwellenfunktion $\Phi_k(\underline{R})$, die nur von der Relativkoordinate $\underline{R}$ der Kerne abhängt, und einer elektronischen Wellenfunktion $\psi_k(\underline{r}, \underline{R})$ (mit einer parametrischen Abhängigkeit von $\underline{R}$) darstellen (Janev 1976):

$$\Psi_{ges}(\underline{r}, \underline{R}) = \sum \Phi_k(\underline{R}) \psi_k(\underline{r}, \underline{R}). \quad (2.7)$$

Der Vektor $\underline{r}$ beschreibt sämtliche Koordinaten der Elektronen, $\underline{r} = (\underline{r}_1, \dots, \underline{r}_N)$. Mit dem separierten Hamiltonoperator leitet sich unter der Annahme, daß der Satz von Wellenfunktionen $\{\psi_k\}$ vollständig und orthogonal ist, folgendes Gleichungssystem her:

$$(T_R + H_{k1} + K_{k1} - E_{ges}) \Phi_k(\underline{R}) = -\sum_{k \neq 1} (H_{k1} + K_{k1}) \Phi_k(\underline{R}), \quad (2.8)$$

wobei die Matrixelemente H_{k1} und K_{k1} wie folgt definiert sind:

$$H_{k1} = \langle \psi_1 | H_{e1} | \psi_k \rangle \quad (2.9)$$

und

$$K_{k1} = \langle \psi_1 | T_R | \psi_k \rangle - \hbar^2 / \mu \langle \psi_1 | \underline{\nabla}_R | \psi_k \rangle \underline{\nabla}_R. \quad (2.10)$$

Die Größe H_{k1} ist die Konfigurationswechselwirkung der elektronischen Zustände ψ_1 und ψ_k , die Matrixelemente K_{k1} beschreiben die kinematische Kopplung der Kernbewegung mit der Elektronenbewegung.

Eine Betrachtung der zeitabhängigen Schrödingergleichung zeigt, daß die Übergänge zwischen den Zuständen zum einen durch die Konfigurationskopplung H_{k1} bewirkt werden; die kinematische Kopplung K_{k1} spaltet in zwei Anteile auf. Der erste Anteil ist die Radialkopplung, welche von der Relativgeschwindigkeit der

beiden Teilchen abhängt, der zweite Anteil ist die Rotationskopplung. Diese hängt vom Drehimpuls des molekularen Systems ab und kann bei kleinen Stoßgeschwindigkeiten oft vernachlässigt werden.

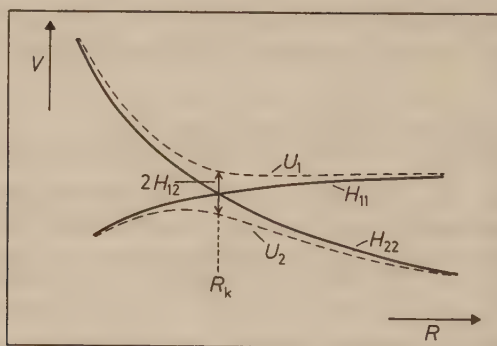
Im folgenden kann durch die Wahl der elektronischen Wellenfunktionen zwischen verschiedenen Darstellungsarten unterschieden werden. Die adiabatische Darstellung der Molekülzustände nimmt den Satz $\{\psi_k\}$ als Eigenfunktionen des elektronischen Hamiltonoperators H_{e1} an, es gilt dann:

$$\langle \psi_1 | H_{e1} | \psi_k \rangle = U_1 \delta_{1k}. \quad (2.11)$$

Gleichung 2.8 vereinfacht sich dann zu

$$(T_R + U_1 + K_{11}^a - E_{00}^a) \Phi_1^a = - \sum_{k \neq 1} K_{k1}^a \Phi_k^a. \quad (2.12)$$

(Der Superscript 'a' kennzeichnet die adiabatische Darstellung.) Die Kopplung zwischen verschiedenen Kernwellenfunktionen wird nur noch von der kinematischen Wechselwirkung K_{k1}^a verursacht. Für sehr kleine Stoßgeschwindigkeiten verschwinden die Kopplungsterme K_{k1}^a , das Gleichungssystem wird dadurch entkoppelt. Die Lösungen



Figur 2.1 Adiabatische (—) und diabatische (---) Darstellung der Potentialkurven eines molekularen Zwei-Zentren-Systems. Die adiabatischen Potentialkurven besitzen bei R_k eine sogenannte vermiedene Kreuzung.

dieses Gleichungssystems sind die molekularen Kernwellenfunktionen im elektronischen Potential U (Born-Oppenheimer-Näherung, Born und Oppenheimer 1932). Der Verlauf von U in Abhängigkeit von R wird als Potentialkurve bezeichnet. Da der Stoßprozeß adiabatisch verläuft, gibt es keine Übergänge in andere Zustände. Bei höheren Stoßgeschwindigkeiten werden die Terme K_{k1} größer und induzieren in den Bereichen, wo U und U_k sich energetisch sehr nahe kommen bzw. wo eine vermiedene Kreuzung vorliegt, nichtadiabatische Übergänge zwischen den Zuständen.

Eine zweite Möglichkeit ist die diabatische Darstellung von Zuständen. Die elektronischen Wellenfunktionen werden hierbei so gewählt, daß die Matrixelemente der kinematischen Kopplung K_{k1} für alle Kernabstände R möglichst klein werden. Die Matrix H_{k1} hat nun nicht mehr Diagonalgestalt, und die Übergänge zwischen den Zuständen beruhen auf der Konfigurationswechselwirkung H_{k1} . Das Gleichungssystem 2.8 lautet in diesem Fall

$$(T_R + H_{11} - E_{g00}) \Phi_1^d = - \sum_{k \neq 1} H_{k1} \Phi_k^d. \quad (2.13)$$

Die Eigenwerte der diabatischen Wellenfunktionen $H_{11}(R)$ besitzen bei R_k eine Kurvenkreuzung, dort wo die adiabatischen Kurven eine Pseudokreuzung aufweisen (vgl. Figur 2.1). Die Differenz der adiabatischen Potentialkurven am Kreuzungspunkt ist durch

$$\varepsilon = 2 H_{k1} \quad (2.14)$$

gegeben (v. Neumann und Wigner 1929). Im Fall sich nicht kreuzender Potentialkurven können ebenfalls Übergänge induziert werden, wenn Gleichung 2.14 erfüllt ist, also der Abstand $|H_{kk} - H_{11}|$ gleich dem doppelten Wert des Kopplungsmatrixelements H_{k1} ist. Dieser Sachverhalt wird durch die sogenannte Demkov-Kopplung beschrieben (Demkov 1964).

Für nichtadiabatische Übergänge zwischen den Zuständen gelten verschiedene Auswahlregeln. Ein molekularer Zustand wird durch die folgenden Quantenzahlen beschrieben (Herzberg 1950, Nikitin

und Umanskii 1984):

- Λ ist die Projektion des Gesamtbahndrehimpulses auf die Kernverbindungsachse.

- S ist der Betrag des Gesamtspins.

- m_s ist die Projektion des Spins auf die Kernverbindungsachse.

- σ ($\sigma = +$ oder $-$) gibt die Reflexionssymmetrie des ortsabhängigen Teils der Wellenfunktion an einer Ebene, die die Kernverbindungsachse enthält, an.

Bei gleichen Kernen kommt noch eine Quantenzahl für die Parität des Zustands hinzu.

Die Übergänge zwischen den molekularen Zuständen werden in diesem Geschwindigkeitsbereich durch die Konfigurationswechselwirkung und die Radialkopplung hervorgerufen. Für die Konfigurationswechselwirkung gelten keine besonderen Auswahlregeln (die Parität des Zustands muß erhalten bleiben, Übergänge von $^1\Sigma^+$ nach $^1\Sigma^-$ sind verboten). Übergänge durch Radialkopplung werden durch die folgenden Auswahlregeln beschrieben:

$$\Delta\Lambda = 0; \Delta S = 0; \Delta m_s = 0; \Delta\sigma = 0. \quad (2.15)$$

Weitere Auswahlregeln (z.B. hinsichtlich des Core-Zustands der separierten Atome, die experimentell gefunden wurde und bei 'reinen' Zuständen auftritt) werden später diskutiert.

II.2. Klassische Beschreibung umladender Stöße, Niehaus-Modell

Beim klassischen Modell des Elektroneneinfangs wird der Einfang des Elektrons auf einer klassisch erlaubten Bahn über die Potentialbarriere, die sich dem Targetelektron zwischen Ion und Atom entgegenstellt, beschrieben (Bohr und Lindhard 1954, Mann et al. 1981). Bei der Annäherung beider Stoßpartner wird die Barriere abgesenkt. Die maximale Höhe der Potentialbarriere ist

$$V_{max} = -\alpha (Z_A + Z_B + 2 (Z_A Z_B)^{1/2}) / R \quad (2.16)$$

(mit $\alpha := e^2/4\pi\epsilon_0$, R : Kernabstand, Z_A : Ladungszahl des Projektilions, Z_B : effektive Rumpf-Ladungszahl des Targets.). Bei einem bestimmten Kernabstand R_0 ist die Höhe der Potentialbarriere gleich der Bindungsenergie des Targetelektrons. Dieser Abstand bestimmt sich aus der Beziehung

$$V_{max} = -I - \alpha Z_A / R_0. \quad (2.17)$$

Die rechte Seite dieser Gleichung gibt das durch die Ladung des Projektilions verschobene Niveau im Atom B an (I ist die Ionisierungsenergie). Das Elektron kann sich nun im gemeinsamen Potential von Ion und Atom bewegen. Beim Auseinanderlaufen wird die Potentialbarriere wieder angehoben. Sobald sie den gleichen Wert wie die Energie des Elektrons besitzt, kann dieses die Barriere nicht mehr überwinden und bleibt beim Projektil oder beim Target, abhängig davon, wo es sich zum Zeitpunkt der Anhebung gerade befindet. Wird nun die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Elektrons bei beiden Stoßpartnern als gleich angenommen, so ergibt sich der Wirkungsquerschnitt für den Einfang des Elektrons zu

$$\sigma = 1/2 \pi R_0^2. \quad (2.18)$$

Ryufuku et al. (1980) haben das Modell dahingehend modifiziert, daß der Übergang des Elektrons nur stattfinden soll, wenn ein unbesetztes Energieniveau des Projektilions energieresonant mit der Energie des Elektrons ist. Dieser Zustand wird dadurch

erreicht, daß bei der Annäherung im Stoß die Niveaus aufgrund der Stark-Verschiebung durch die Ladung des jeweils anderen Teilchens abgesenkt werden. Zusätzlich zur Potentialabsenkung tritt nun die Energieresonanzbedingung hinzu:

$$-I_B - \alpha Z_A / R = -I_A + E - \alpha Z_B / R \quad (2.19)$$

woraus sich der Kernabstand, bei dem das Elektron eingefangen wird, zu

$$R_0 = \alpha (Z_A - Z_B) / (I_A - I_B - E) \quad (2.20)$$

ergibt. I_A ist die Ionisierungsenergie vom Projektil und E ist die Anregungsenergie des Zustands, in welchen der Einfang erfolgt. In der Bedingung für die Potentialabsenkung (2.17) muß das Gleichheitszeichen in kleiner oder gleich geändert werden. Aus dieser Gleichung und aus Gleichung 2.19 läßt sich das Niveau ermitteln, für das die Bedingung zuerst eintritt. Bei der klassischen Betrachtung sollte der Einfang des Elektrons sehr selektiv in dieses Niveau erfolgen.

II.2.1 Erweiterung auf den Mehr-Elektroneneinfang

Das klassische Modell läßt sich auf den Prozeß des Einfangs mehrerer Elektronen erweitern (Barany et al. 1985, Hvelplund et al. 1985). Nachdem die Potentialbarriere für das erste Elektron abgesenkt ist, wird angenommen, daß dieses mit der Wahrscheinlichkeit von 1 zum Projektil überwechselt. Nun wird das System aus dem einfach geladenen Targetion und dem Projektilion mit verringerter Ladung betrachtet. Für den Transfer des zweiten Elektrons, das stärker gebunden ist, muß die Potentialbarriere noch weiter abgesenkt werden, was allgemein für das i -te Elektron bei einem Kernabstand

$$R_i = \alpha (2(q - i + 1)^{1/2} i^{1/2} + 1) / I_i \quad (2.21)$$

(mit I_i = i-te Ionisierungsenergie des Targets) erfüllt ist. Analog zur Vorgehensweise bei der einfachen klassischen Beschreibung lassen sich aus diesen Radien Wirkungsquerschnitte ableiten. Außerdem läßt sich der Energiedefekt der Reaktion bestimmen.

II.2.2 Niehaus-Modell

Die bislang umfassendste Formulierung des klassischen Modells stammt von Niehaus (1986). Bisher wurde nur die Annäherung beider Stoßpartner betrachtet. Niehaus unterscheidet zwischen den Wegen in den Stoß hinein und aus dem Stoß heraus. Ferner werden die Elektronen, die sich im gemeinsamen Potentialtopf bewegen können, als molekulare Elektronen betrachtet. Eine weitere Ergänzung ist die Definition eines Reaktionsfensters anhand der quantenmechanischen Unbestimmtheit der Höhe der Potentialbarriere. Im Folgenden soll das Modell in seinen wesentlichen Teilen skizziert werden.

Bei der gegenseitigen Annäherung von Projektil und Target werden die Elektronen durch die Absenkung der Potentialbarriere molekular und besetzen molekulare Zustände im gemeinsamen Feld beider Stoßpartner. Beim anschließenden Auseinanderlaufen können die Elektronen entweder vom Projektil oder vom Target eingefangen werden. Die Elektronen werden durch die Reihenfolge, in der sie molekular werden, unterschieden. Wenn z.B. zwei Elektronen eingefangen werden, läßt sich dieses durch verschiedene Kombinationen der molekular gewordenen Elektronen erreichen. Die hierbei unterschiedenen Prozesse werden durch sogenannte "Strings" unterschieden. Der String

$$(j) = (1 \ 0 \ 1 \ 0) \quad (2.22)$$

beschreibt einen Prozeß, bei dem von vier molekular gewordenen Elektronen das Erste und das Dritte vom Projektil eingefangen, das zweite und vierte Elektron hingegen vom Target zurückgefangen werden. Der Wirkungsquerschnitt für den Einfang von r Elektronen

in ein q-fach geladenes Ion ist die Summe aller Wirkungsquerschnitte der verschiedenen Strings, welche diesen Prozeß beschreiben

$$\sigma_{q-r} = \sum_{(j)} \sigma_{q-r}^{(j)}. \quad (2.23)$$

Die Kernabstände, bei denen die Potentialbarriere abgesenkt ist, und ein Elektron molekular wird, berechnen sich ähnlich wie im Modell von Barany et al. (1985), nur wird hier keine Abschirmung der Projektilladung durch die molekular gewordenen Elektronen angenommen:

$$R_t^{in} = \alpha (2 q^{1/2} t^{1/2} + t) / I_t \quad (2.24)$$

bezeichnet den Kernabstand, bei dem das t-te Elektron des Targets molekular wird; I_t ist dessen Bindungsenergie und q die Ladungszahl des Projektils. Beim Auseinanderlaufen erreicht die Potentialbarriere beim Kernabstand $R_t^{out(j)}$ die kritische Höhe. Dieser Kernabstand bestimmt sich zu

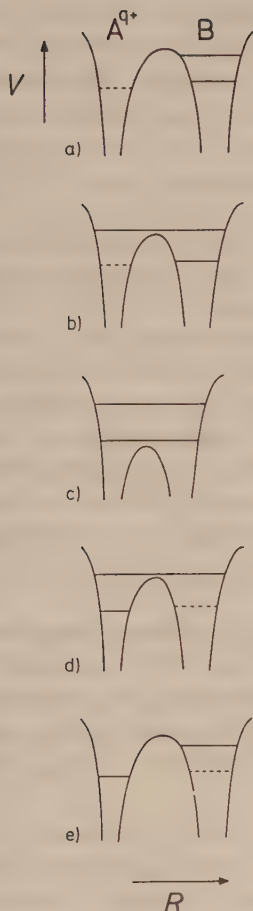
$$R_t^{out(j)}(r_t) = [(q-r_t)^{1/2} + (t+r_t)^{1/2}] R_t^{in(j)} / (q^{1/2} + t^{1/2}) \quad (2.25)$$

(r_t ist die Anzahl von Elektronen, welche bereits vor dem t-ten Elektron vom Projektil eingefangen wurden. Diese Elektronen bewirken eine Abschirmung der Projektilladung, da sie tiefer liegende Niveaus besetzen.).

Die Wahrscheinlichkeit für das Elektron, vom Projektil oder vom Target eingefangen zu werden, bestimmt sich aus dem zur Verfügung stehenden Phasenraum, welcher sich in erster Näherung als Entartungsgrad der möglichen Endzustände ergibt. Die Einfangwahrscheinlichkeit in das Projektil ergibt sich zu

$$W_t(j) = (n_t(j))^2 / [(n_t(j))^2 + (m_t(j))^2], \quad (2.26)$$

wobei $n_t(j)$ und $m_t(j)$ die Hauptquantenzahlen der Zustände sind, die das Elektron im Projektil bzw. Target besetzen würde.



Figur 2.2 Schematische Darstellung des Elektroneneinfangs nach dem Modell von Niehaus. Der dargestellte Prozeß wird durch den String (0 1) beschrieben.

a) Das System $A^{q+} + B$ bei der gegenseitigen Annäherung. Die Potentialbarriere wird abgesenkt.

b) Das erste Elektron ist molekular geworden. Bei der weiteren Annäherung senkt sich die Potentialbarriere noch weiter ab.

c) Das zweite Elektron ist molekular geworden. Der Umkehrpunkt des Stoßes wird erreicht.

d) Beim Auseinanderlaufen wurde die Barriere angehoben. Das innere Elektron ist vom Projektil eingefangen worden.

e) Das äußere Elektron wurde vom Target zurückgefangen.

Dieser Prozeß stellt den Einfang mit gleichzeitiger Targetanregung dar.

Die Bindungsenergien der eingefangenen Elektronen bestimmen sich aus den Abständen $R_t^{\text{out}(j)}$, wobei sich diese für das Projektil zu

$$E_{t,t} = I_t + \alpha q / R_t^{\text{in}} - \alpha (t+r_t) / R_t^{\text{out}(j)} \quad (2.27a)$$

und bei Einfang durch das Target zu

$$E_{t,t} = I_t + \alpha q / R_t^{\text{in}} - \alpha (q-r_t) / R_t^{\text{out}(j)} \quad (2.27b)$$

berechnen. Der Energiedefekt $Q^{(j)}$ einer durch den String (j) beschriebenen Reaktion ergibt sich durch Summation der partiellen Energiedefekte über die Anzahl t_0 der im Stoß molekular gewordenen Elektronen zu

$$Q^{(j)} = \sum_{t=1}^{t_0} (E_t^{(j)}(r_t) - I_t). \quad (2.28)$$

Die Bindungsenergie $E_t^{(j)}(r_t)$ für das t-te molekulare Elektron ist beim Einfang durch das Projektil gleich $E_{r,t}$, beim Rückfang durch das Target gleich $E_{r,t}$. Der Energiedefekt ist also abhängig davon, welche Elektronen eingefangen wurden. Diese Form des klassischen Modells beschreibt prinzipiell auch den Einfang innerer Elektronen des Targets. Allerdings ist die maximale Anzahl molekularer Elektronen t_0 durch die Ladungszahl q des Projektils bzw. die Anzahl der Targetelektronen begrenzt. Bei Projektilen mit $q < 7$ läßt sich also niemals der Einfang eines ns-Elektrons aus einem Target mit gefüllter np-Schale beschreiben.

Ein Reaktionsfenster leitet sich aus der quantenmechanischen Unbestimmtheit der Höhe der Potentialbarriere ab. Der Stoß dauert nur eine bestimmte Zeit Δt , während dieser Zeit wird die Höhe der Potentialbarriere mit der Energie des Elektrons verglichen, um den Übergang in das molekulare Niveau zu bestimmen. Für die Unbestimmtheit des Potentials gilt dann

$$\Delta U_0^{QM} \Delta t \approx \hbar. \quad (2.29)$$

Eine klassische Unsicherheit, die durch Messung einer zeitveränderlichen Größe während eines endlichen Meßintervalls Δt entsteht, ist durch

$$\Delta U_0^K = (dU_0/dt) \Delta t = |dU_0/dR| v_{rad} \Delta t \quad (2.30)$$

(v_{rad} = Geschwindigkeit der radialen Annäherung) gegeben. Ein minimaler Wert für die Unsicherheit in der Bestimmung der Potentialhöhe ergibt sich durch Gleichsetzen von $\Delta U_0^{QM} = \Delta U_0^K$ zu

$$\Delta V_B^{min} = (\hbar |dV_B/dR| v_{rad})^{1/2}. \quad (2.31)$$

Diese Unbestimmtheit ist auf dem einlaufenden und dem auslaufenden Weg vorhanden. Für ein bestimmtes Elektron folgt hieraus, daß die Bindungsenergie nicht scharf definiert ist, sondern eine angenommene Gaußverteilung von Bindungsenergien um den durch Gleichung 2.27 bestimmten Wert annimmt. Die Breite dieser Verteilung berechnet sich aus den Breiten der Verteilungen für die Barrierenhöhe auf dem ein- und auslaufendem Weg:

$$\Delta Q = [(\Delta V_B^{min, in})^2 + (\Delta V_B^{min, out})^2]^{1/2} \quad (2.32)$$

Das Reaktionsfenster wird nun durch die Verteilung

$$W(Q) = (\Delta Q^{jj})^{-1} \exp\{-(Q-Q^{jj})^2/(\Delta Q^{jj})^2\} \quad (2.33)$$

definiert. Die Breite des Reaktionsfensters ist die Faltung der auftretenden Energieunschärfen aller beteiligten Elektronen:

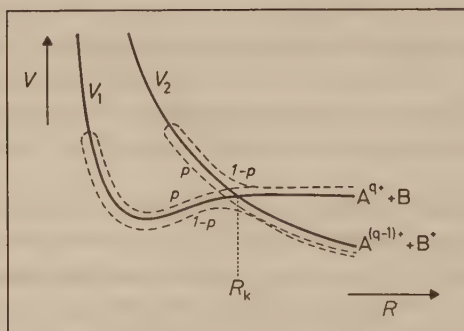
$$\Delta Q^{jj} = \left[\sum_{t=1}^{t_0} (\Delta Q_t)^2 \right]^{1/2}. \quad (2.34)$$

Die Verteilung $W(Q)$ gibt die relativen Wahrscheinlichkeiten wieder, mit denen Reaktionskanäle mit einem Energiedefekt Q auftreten.

Das klassische Modell nach Niehaus ergibt gute Obereinstimmung mit experimentellen Resultaten. Nicht nur die Lage des Reaktionsfensters, sondern auch die absolute Größe der Wirkungsquerschnitte wird in vielen Fällen gut wiedergegeben. Abweichungen treten dann auf, wenn innere Elektronen (z.B. s-Elektronen) eingefangen werden, die im Modell nicht molekular werden sollten (falls die Projektilladung einen bestimmten Wert nicht überschreitet). Weitere Diskrepanzen zeigen sich in solchen Fällen, in denen innere Projektilelektronen angeregt werden; diese Prozesse werden nicht von dem Modell beschrieben.

II.3. Landau-Zener Modell und Erweiterungen

Das von Landau (1932) und Zener (1932) entwickelte Modell beschreibt den Umladungsprozeß anhand des Übergangs zwischen den molekularen Potentialkurven des im Stoß vorliegenden Moleküls. Die Beschreibung erfolgt für ein reines Zwei-Zustands-System. In Figur 2.3 sind die diabatischen Potentialkurven für diesen idealisierten Fall dargestellt. Der Anfangszustand aus dem q-fach geladenen Ion A^{q+} und dem Atom B wird durch eine annähernd horizontale Potentialkurve beschrieben (Die Wechselwirkung zwischen dem Ion und dem Atom wird bei großen Abständen im wesentlichen durch die Polarisationsanziehung bestimmt.), die Potentialkurve des Endzustands $A^{(q-1)+}/B^+$ ist in guter Näherung



Figur 2.3 Schematische Darstellung der molekularen Potentialkurven. p ist die Wahrscheinlichkeit, beim Durchlaufen des Kreuzungspunktes auf der diabatischen Potentialkurve zu verbleiben.

eine Coulombkurve. Diese Potentialkurven, V_1 und V_2 , sind mit durchgezogenen Linien dargestellt. Die Landau-Zener Wahrscheinlichkeit p gibt an, mit welcher Wahrscheinlichkeit das System auf der diabatischen Potentialkurve verbleibt, wenn es die Kurvenkreuzung durchläuft. Analog ist $1 - p$ die Wahrscheinlichkeit am Kreuzungspunkt die Potentialkurve zu wechseln. Die Gesamtwahrscheinlichkeit P für einen Übergang zwischen den Potentialkurven bestimmt sich dann zu

$$P = 2 p (1 - p), \quad (2.35)$$

da der Kreuzungspunkt zweimal durchlaufen wird. Von Landau und Zener wurde für p die Beziehung

$$p = \exp\{-2\pi |H_{12}|^2 / (\hbar v_k \Delta F)\} \quad (2.36)$$

angegeben. H_{12} ist das Matrixelement der Kopplung zwischen den Zuständen und entspricht der halben Aufspaltung zwischen den adiabatischen Potentialkurven an der vermiedenen Kreuzung; v_k ist die Radialgeschwindigkeit und ΔF gibt die Differenz der Steigungen der diabatischen Potentialkurven am Kreuzungspunkt an. Die Radialgeschwindigkeit läßt sich in der Näherung gerader Trajektorien leicht zu

$$v_k = v_0 (1 - H_{11}/E_p - b^2/R_k^2) \quad (2.37)$$

bestimmen (H_{11} = Potential am Kreuzungspunkt, E_p = Stoßenergie im Schwerpunktsystem, b = Stoßparameter, R_k = Kernabstand am Kreuzungspunkt). Die Differenz der Steigungen der Potentialkurven ist in Coulombnäherung

$$\Delta F = \alpha (q - 1) / R_k^2. \quad (2.38)$$

Die letzte zur Berechnung der Wahrscheinlichkeit benötigte Größe, das Kopplungselement H_{12} , ist nicht so einfach zu bestimmen. Im allgemeinen Fall ist zur Berechnung der Kopplungsstärke die Bestimmung der adiabatischen Potentialkurven am Kreuzungspunkt oder die Lösung der Austauschintegrale notwendig. Durch Skalierung aller bis dahin bekannten Umladungsquerschnitte nackter Ionen in atomarem Wasserstoff konnten Olson und Salop (1976) jedoch einen semiempirischen Fit für H_{12} angeben:

$$H_{12}/E_1 = 9.13 q^{-1/2} \exp[-1.324 (I/E_1 / q)^{1/2} R_k/a_0]; \quad (2.39)$$

$E_1 = 27.21$ eV, I ist die Ionisierungsenergie des Targets; sie ist hier eingeführt, um auch andere Targetatome als Wasserstoff zu

beschreiben.

II.3.1. Reaktionsfenster nach Kimura et al.

Die Gleichung für die Übergangswahrscheinlichkeit nach Landau und Zener zeigt, daß diese für ein bestimmtes Stoßsystem im wesentlichen von zwei Größen abhängt, dies sind die Lage der Kurvenkreuzung R_k und der Stoßparameter b (durch die Wahl des Stoßsystems sind I und q bestimmt, v_k und H_2 hängen nur noch von b und R_k , bzw. nur noch von R_k ab.). Die im System möglichen Reaktionskanäle legen verschiedene Werte für den Kreuzungsradius fest, die Übergangswahrscheinlichkeit an einer dieser Kreuzungen variiert daher nur noch mit dem Stoßparameter. Der Wirkungsquerschnitt σ_i für einen Reaktionskanal berechnet sich aus der Integration über alle Stoßparameter, welche zur Umladung führen können:

$$\sigma_i = 2\pi \int_0^{R_{k,i}} P_i(b) b db. \quad (2.40)$$

Der totale Wirkungsquerschnitt einer Umladungsreaktion ist die Summe der zustandsselektiven Wirkungsquerschnitte der einzelnen Kanäle

$$\sigma_{tot} = \sum_i \sigma_i. \quad (2.41)$$

Für einen einzelnen Reaktionskanal läßt sich der Wirkungsquerschnitt durch einen Transmissionskoeffizienten T ausdrücken, der folgendermaßen definiert ist:

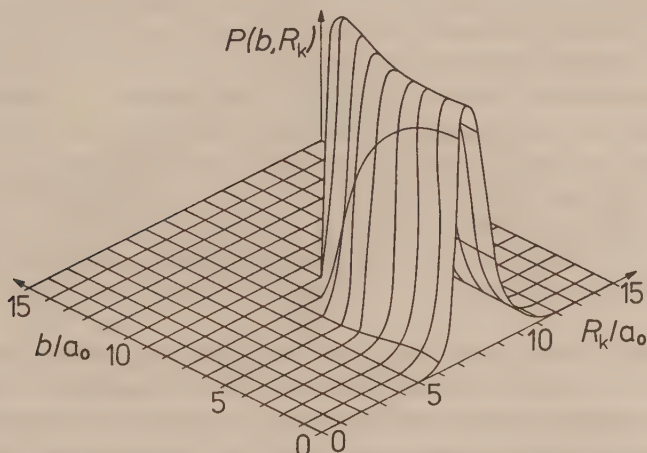
$$T(R_k, v) = \sigma_i(R_k, v) / (\pi R_k^2), \quad (2.42)$$

wobei $\sigma_i(R_k, v)$ der nach Gleichung 2.40 bestimmte Wirkungsquerschnitt ist. Eine Analyse des Transmissionskoeffizienten T zeigt, daß sehr große R_k -Werte zur Umladung nicht beitragen, da die Kopplung zwischen den Zuständen bei großen Abständen sehr klein wird. Auch für sehr kleine R_k -Werte ergibt die

Transmissionsfunktion den Wert null, da hier die Kopplung so stark ist, daß sich das System stets entlang der adiabatischen Potentialkurve bewegt. In einem mittleren Kernabstandsbereich nimmt die Landau-Zener Wahrscheinlichkeit den Wert $1/2$ an, Kurvenkreuzungen die hier liegen tragen sehr effektiv zum Elektroneneinfang bei. Diese qualitativen Überlegungen begründen das experimentell beobachtete Reaktionsfenster, d.h. einen begrenzten Bereich von Kurvenkreuzungen, welche zum Elektroneneinfang beitragen. Einsetzen der Gleichungen 2.35 bis 2.40 in Gleichung 2.42 ergibt einen Ausdruck für den Transmissionskoeffizienten in Abhängigkeit von der Stoßgeschwindigkeit (Energieabhängigkeit des Reaktionsfensters) und der Lage der Kurvenkreuzung (Taulbjerg 1986)

$$T(R_k, v) = G(\beta(R_k, v)) = 2 \int_0^1 \exp[-\beta x^{-1/2}] (1 - \exp[-\beta x^{-1/2}]) dx, \quad (2.43)$$

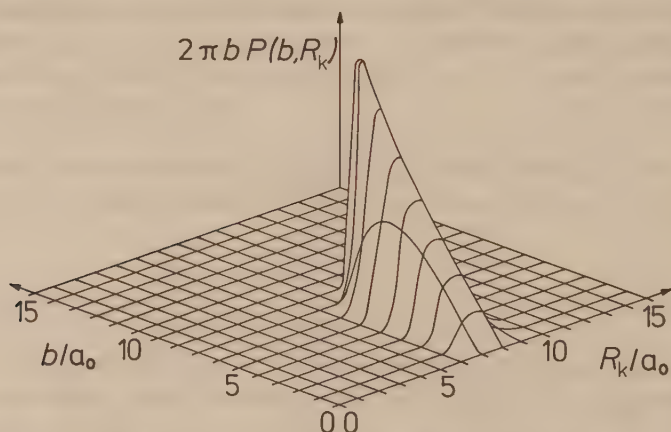
wobei $\beta = 2\pi |H_z|^2 / (\hbar v \Delta F)$ ist. Da $T(R_k, v)$ in Form einer Exponentialintegralfunktion vorliegt, ist nur eine numerische Auswertung möglich. Durch Variation der Stoßgeschwindigkeit v



Figur 2.4 Übergangswahrscheinlichkeit $P = 2 p (1 - p)$ nach Landau und Zener als Funktion vom Kernabstand der Kurvenkreuzung R_k und dem Stoßparameter b . (a_0 ist der Bohr'sche Radius.)

oder des Kreuzungsradius R_k kann nun die Abhängigkeit des Wirkungsquerschnitts von den Eigenschaften des Stoßsystems ermittelt werden.

Eine ähnliche Darstellung der Übergangswahrscheinlichkeit nach Landau-Zener ist in Figur 2.4 gezeigt. Auf der x-Achse ist die Lage der Kurvenkreuzung aufgetragen, die y-Achse gibt den Stoßparameter an. In z-Richtung ist die Übergangswahrscheinlichkeit aufgetragen. Die Rechnung wurde für typische Daten der von uns untersuchten Stoßsysteme durchgeführt ($q = 4$, $E = 800$ eV, $I = 14$ eV). Nur in einem kleinen Bereich von Kurvenkreuzungen gibt es eine große Übergangswahrscheinlichkeit. Der günstige Bereich der Kurvenkreuzungen verschiebt sich mit dem Stoßparameter, da sich die Radialgeschwindigkeit ändert. Zur Bestimmung von σ_i sind entsprechend Gleichung 2.40 die Beiträge einzelner Stoßparameter mit dem Faktor $2\pi b$ zu multiplizieren. In Figur 2.5



Figur 2.5 Wie Figur 2.4, nur mit dem Faktor $2\pi b$ gewichtet. Die hier aufgetragenen Werte sind die Integranden bei der Berechnung der zustandsselektiven Wirkungsquerschnitte nach Gleichung 2.40.

sind daher die Übergangswahrscheinlichkeiten mit dem Faktor $2\pi b$ gewichtet dargestellt. Es zeigt sich, daß das Maximum bei $R_k \approx b \approx 7 - 8 a_0$ liegt; d.h. streifende Stöße tragen am meisten zur

Umladung bei. Bei bekannten Potentialkurven läßt sich der Kernabstand der Kurvenkreuzung in den Energiedefekt der Reaktion umrechnen. Durch die zusätzliche Integration über den Stoßparameter ergibt sich die üblicherweise dargestellte Form des Reaktionsfensters als Funktion des Energiedefektes.

II.3.2. Taubjerg-Faktor

Der von Salop und Olson angegebene semiempirische Fit für das Kopplungsmatrixelement H_2 basiert auf den Messungen der Umladung nackter (hochgeladener) Ionen in atomarem Wasserstoff und ist zur Beschreibung anderer Targetatome durch die Hinzunahme der Abhängigkeit von der Ionisierungsenergie des Targets erweitert worden. Kimura et al. (1984) haben durch Anpassung an ihre Messungen (Umladung von nicht vollständig ionisierten Ionen in He) mit einem um 40% reduzierten Wert für H_2 gute Obereinstimmung gefunden. Der Vorfaktor in Gleichung 2.39 wurde daher von ihnen auf 5.48 geändert. Eine allgemeine Betrachtung hierzu stammt von Taubjerg (1986). Das von Olson und Salop bestimmte Matrixelement H_2 ist die Hälfte der Energieaufspaltung eines molekularen Ein-Elektronen- Systems an einer vermiedenen Kreuzung. Die Zustände in einem Zwei-Zentren-System mit nur einem Elektron korrelieren mit gestörten atomaren Ein-Elektron-Zuständen in einer parabolischen Darstellung. Die Kopplung zwischen dem entarteten Endzustand Ψ_f^p in parabolischer Darstellung und dem Anfangszustand des Elektrons im Wasserstoffatom $\Psi_i(1s)$ wird daher durch den Hamiltonoperator H_{e1} wie folgt beschrieben:

$$\langle \Psi_f^p(n_1, n_2, m) | H_{e1} | \Psi_i(1s) \rangle = \delta_{n_1, 0} \delta_{n_2, n-1} \delta_{m, 0} H_2^{0s} \quad (2.44)$$

(n = Hauptquantenzahl des atomaren Endzustands). Diese Gleichung definiert die von Olson und Salop bestimmten Matrixelemente. Für den Fall, daß die Ionen nur teilweise ionisiert sind, wird die Entartung der Endzustände im Projektil aufgehoben. Es gibt nun Kreuzungen mit den Niveaus jeder Unterschale. Die Kopplungselemente müssen daher modifiziert werden. Die Darstellung der

Kopplungsmatrix in sphärischen Koordinaten lautet

$$\langle \Psi_f^s(nlm) | H_{01} | \Psi_i(1s) \rangle = f_{n1} \delta_{m,0} H_2 z^{0s}. \quad (2.45)$$

Die Faktoren f_{n1} sind die Elemente der Matrix, welche zwischen der parabolischen Darstellung und der sphärischen Darstellung transformiert:

$$f_{n1} = \langle \Psi_f^s(nlm) | H_{01} | \Psi_f^p(0, n-1, 0) \rangle. \quad (2.46)$$

Für diesen speziellen Fall lassen sich die Elemente der Transformationsmatrix zu

$$f_{n1} = (-1)^{n+1-1} (2l+1)^{1/2} \Gamma(n) / [\Gamma(n+1) \Gamma(n-1)]^{1/2} \quad (2.47)$$

bestimmen (Burgdörfer 1983). Die verallgemeinerte Form der Kopplungsmatrixelemente H_2 lautet damit

$$H_2 / E_h = 9.13 f_{n1} q^{-1/2} \exp[-1.324 R_k / a_0 (I/E_h)^{1/2} q^{-1/2}] \quad (2.48)$$

und gibt die Kopplung zwischen dem Anfangszustand und einem Endzustand mit den Quantenzahlen n_l in einem teilweise ionisierten Ion der Ladung q an.

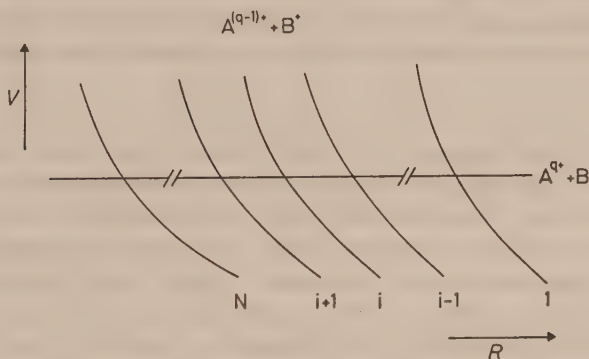
II.3.3 Multi-Channel-Landau-Zener Rechnungen

Die bisherigen Überlegungen zur Übergangswahrscheinlichkeit gelten für reine Zwei-Zustands-Systeme. Für realistische Stoßsysteme ist diese Annahme meistens jedoch nicht erfüllt. Vielmehr gibt es mehrere mögliche Ausgangskanäle mit unterschiedlichen Kreuzungsradii. Eine schematische Darstellung der Situation ist in Figur 2.6 gezeigt. Für jede dieser Kreuzungen lassen sich die Landau-Zener Wahrscheinlichkeiten p_i berechnen. Bei der Bestimmung der zustandsselektiven Wirkungsquerschnitte muß nun beachtet werden, daß eine weiter innen liegende Kreuzung nicht mehr vom ganzen einlaufenden Teilchenfluß erreicht wird. Ein Teil der

einlaufenden Ionen ist an den äußeren Kreuzungen bereits auf die Potentialkurven der Umladungskanäle gewechselt. Analog gilt diese Überlegung für den Fluß von Teilchen welcher eine bestimmte Kreuzung von innen (d.h. von kleineren R -Werten her) erreicht. Nur ein bestimmter Teil der einlaufenden Ionen hat die Kreuzung auf dem Weg in den Stoß passiert, weiter innen liegende Kreuzungen führen diesen Fluß teilweise in die Ausgangskanäle, so daß nur ein kleinerer Teil zur betrachteten Kreuzung zurückläuft und dort zur Umladung beiträgt. Die Übergangswahrscheinlichkeit P_i an einer Kurvenkreuzung R_i wurde für ein System aus N Kreuzungen, die von innen nach außen durchnummeriert sind, von Salop und Olson (1976) zu

$$P_1 = p_1 p_2 \dots p_N (1-p_1) [1 + (p_{1+1} p_{1+2} \dots p_N)^2 + (p_{1+1} p_{1+2} \dots p_{N-1})^2 (1-p_N)^2 + (p_{1+1} p_{1+2} \dots p_{N-2})^2 (1-p_{N-1})^2 + \dots + p_{1+1}^2 (1-p_{1+2})^2 + (1-p_{1+1})^2] \quad (2.49)$$

angegeben. Bei der Berechnung der zustandsselektiven Wirkungsquerschnitte nach Gleichung 2.40 muß noch beachtet werden, daß



Figur 2.6 Potentialkurvenschema für ein System mit mehreren konkurrierenden Ausgangskanälen. Der einlaufende Teilchenfluß ϕ_0 verzweigt an den verschiedenen Kreuzungen.

für Stoßparameter, die den Abstand einer inneren Kurvenkreuzung übertreffen, nicht alle Kreuzungen vom System durchlaufen werden

und einige der in Gleichung 2.49 enthaltenen Terme wegfallen. Vergleiche zwischen experimentellen Daten und MCLZ-Rechnungen zeigen, daß die Berücksichtigung der Konkurrenz der einzelnen Kanäle bessere Resultate liefert als die reinen Zwei-Zustands Rechnungen (Kimura et al. 1984, McCoullough et al. 1987).

II.3.4. Erweiterte MCLZ-Rechnungen: Berücksichtigung mehrerer Eingangskanäle und empirischer diabatischer Faktor

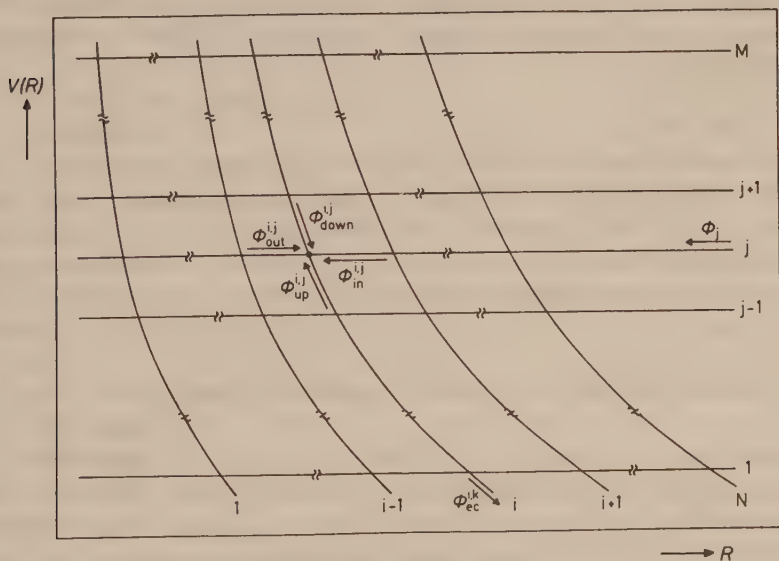
Die Landau-Zener Rechnungen geben unter Berücksichtigung der unterschiedlichen Ausgangskanäle ein sehr realistisches Bild der Verhältnisse in Stößen mehrfach geladener Ionen mit Atomen. Eine weitere Korrektur der Kopplungsmatrixelemente mit den Taulbjerg-Faktoren liefert für viele experimentell untersuchte Systeme eine gute Beschreibung. Detaillierte Untersuchungen des Elektroneneinfangs in Ar^{q+}/Ar , Ne und Ne^{q+}/He - Stößen, die von uns durchgeführt wurden, zeigen aber charakteristische Abweichungen von den Vorhersagen des Modells. Diese Unterschiede beruhen auf den Tatsachen, daß zum einen der Elektroneneinfang mit gleichzeitiger Anregung des Projektils stattfinden und zum anderen die Umladung durch metastabile Projektilzustände dominiert werden kann.

Die durch Elektronenstoß in der Ionenquelle erzeugten Ionen liegen nur zum Teil im elektronischen Grundzustand vor. Der andere Teil der Ionen befindet sich in angeregten metastabilen Zuständen. Genauere Untersuchungen der Zustandsverteilung nach Elektronenstoßionisierung (Nakamura et al. 1985, Wiesemann et al. 1987, Binder 1987, Lebius 1988) zeigen, daß die relative Besetzung der elektronischen Zustände bei höheren Energien der ionisierenden Elektronen die durch die statistischen Gewichte ($\Sigma 2J + 1$) der Endzustände gegebenen Werte erreicht, sofern die Anregungsenergie viel kleiner als die Ionisierungsenergie ist. D.h., es können durchaus mehr metastabile Ionen als Grundzustandsionen im Strahl vorhanden sein. In der Regel besitzen zwei- und dreifach geladene Edelgasionen zwei niedrig liegende

metastabile Zustände (z.B. doppelt geladene Ionen: Grundzustand 0P , 1.metastabiler Zustand 1D , 2.metastabiler Zustand 1S ; dreifach geladene Ionen: 4S , 2D , 2P , mit Anregungsenergien von einigen eV).

Das Potentialkurvenbild in Figur 2.6 muß daher folgendermaßen ergänzt werden: Es gibt mehrere annähernd parallel einlaufende Potentialkurven, die verschiedene Projektilezustände beschreiben. Die auslaufenden Coulombkurven besitzen mit jeder dieser Kurven einen Kreuzungspunkt, an welchem sich die ein- und auslaufenden Teilchenflüsse verzweigen können.

Die gleichzeitige Beschreibung mehrerer einlaufender Kanäle läßt sich durch eine Erweiterung des MCLZ-Modells erreichen. Figur 2.7 zeigt eine schematische Darstellung der Situation. Das System



Figur 2.7 Schematisches Potentialkurvendiagramm für ein System aus M einlaufenden und N auslaufenden Kanälen. Die eingezeichneten Größen ϕ verdeutlichen die vier möglichen Teilchenflüsse, die jede Kreuzung erreichen.

besteht aus M einlaufenden Potentialkurven und N auslaufenden Potentialkurven. Es bildet also ein Gitter von $M * N$ Kreuzungspunkten; für jeden dieser Kreuzungspunkte (i,j) läßt sich die Landau-Zener Wahrscheinlichkeit $p_{i,j}$ bestimmen. Die im Modell zu bestimmende Größe ist der Teilchenfluß $\phi_{ec}^{i,k}$ von einem definierten Anfangszustand k in einen Endzustand i . Zur Berechnung werden vier Hilfsgrößen definiert, zwei davon beschreiben den Fall sich annähernder Teilchen:

- $\phi_{in}^{i,j}$ ist der Teilchenfluß, der ausgehend von der Kreuzung $(i+1,j)$ in die Kreuzung (i,j) hineinströmt.

- $\phi_{up}^{i,j}$ ist der Fluß, der über einen Umladungskanal vom Kreuzungspunkt $(i,j-1)$ auf die Kreuzung (i,j) zuläuft. Die anderen beiden Größen beschreiben den Fall sich entfernender Teilchen:

- $\phi_{out}^{i,j}$ gibt den Fluß an, welcher von kleineren R -Werten her auf die Kreuzung trifft.

- $\phi_{down}^{i,j}$ ist der von oben auf eine Kreuzung zulaufende Fluß. Anhand dieser Festlegung lassen sich nun die Größen ϕ rekursiv definieren:

$$\begin{aligned}\phi_{in}^{1,j} &= 0 && \text{für } b > R_c^{1,j}, i < N \\ \phi_{in}^{i,j} &= p^{i+1,j} \phi_{in}^{i+1,j} + (1-p^{i+1,j}) \phi_{up}^{i+1,j} && b < R_c^{i,j}, i < N \\ \phi_{in}^{N,j} &= \phi_j && i = N\end{aligned}\quad (2.50a)$$

$$\begin{aligned}\phi_{up}^{i,j} &= 0 && \text{für } b > R_c^{i,j}, j > 1 \\ \phi_{up}^{i,j} &= p^{i,j-1} \phi_{up}^{i,j-1} + (1-p^{i,j-1}) \phi_{in}^{i,j-1} && b < R_c^{i,j}, j > 1 \\ \phi_{up}^{i,j} &= 0 && j = 1\end{aligned}\quad (2.50b)$$

$$\begin{aligned}\phi_{down}^{i,j} &= p^{i,j+1} \phi_{down}^{i,j+1} + (1-p^{i,j+1}) \phi_{out}^{i,j+1} && \text{für } b < R_c^{i,j+1}, j < M \\ \phi_{down}^{i,j} &= p^{i,j} \phi_{up}^{i,j} + (1-p^{i,j}) \phi_{in}^{i,j} && b > R_c^{i,j+1}, j < M \\ \phi_{down}^{i,M} &= p^{i,M} \phi_{up}^{i,M} + (1-p^{i,M}) \phi_{in}^{i,M} && j = M\end{aligned}\quad (2.50c)$$

$$\begin{aligned}\phi_{out}^{i,j} &= p^{i-1,j} \phi_{out}^{i-1,j} + (1-p^{i-1,j}) \phi_{down}^{i-1,j} && \text{für } b < R_c^{i-1,j}, i > 1 \\ \phi_{out}^{i,j} &= p^{i,j} \phi_{in}^{i,j} + (1-p^{i,j}) \phi_{up}^{i,j} && b > R_c^{i-1,j}, i > 1 \\ \phi_{out}^{i,j} &= p^{i,j} \phi_{in}^{i,j} + (1-p^{i,j}) \phi_{up}^{i,j} && i = 1\end{aligned}\quad (2.50d)$$

(b bezeichnet den Stoßparameter, $P^{i,j}$ sind die Landau-Zener Wahrscheinlichkeiten). Bei allen Gleichungen müssen Fallunterscheidungen getroffen werden, da Kreuzungen mit $R^{i,j} < b$ im Stoß nicht erreicht werden können. Die rekursive Definition bietet den Vorteil, daß sich ein entsprechendes Computerprogramm sehr leicht in einer höheren Programmiersprache schreiben läßt. Ein weiterer Vorteil ist die einfache Struktur der Gleichungen, welche die physikalischen Aspekte klar hervorhebt. Die zustandsselektiven Wirkungsquerschnitte $\sigma^{i,k}$ für die Umladung von einem Anfangszustand k in einen Endzustand i ergeben sich nun durch Lösen der Gleichung

$$\sigma^{i,k} = 2\pi \int_0^{R_{i,k}} \phi_{ec}^{i,k}(b) b db \quad (2.51)$$

mit

$$\begin{aligned} \phi_{ec}^{i,k} &= P^{i,1} \phi_{down}^{i,1} + (1 - P^{i,1}) \phi_{out}^{i,1} & \text{für } b < R^{i,k} \\ \phi_{ec}^{i,k} &= 0 & b > R^{i,k} \end{aligned} \quad (2.52)$$

und der Anfangsbedingung $\phi_j = \delta_{j,k}$.

Eine zweite Modifikation betrifft die bei den Berechnungen der Landau-Zener Wahrscheinlichkeit benutzte Gleichung für die Kopplungsmatrixelemente H_{ij} . Zusätzlich zu dem von Taubjerg eingeführten Faktor f_{n1} enthält die Gleichung noch einen Faktor b_{ij} , der von uns "empirischer diabatischer Faktor" genannt wurde (Lebius et al. 1989, Koslowski et al. 1989):

$$H_{ij} = 9.13 f_{n1} b_{ij} q^{-1/2} \exp\{-1.324 R^{ij} (2 I / q)^{1/2}\}. \quad (2.53)$$

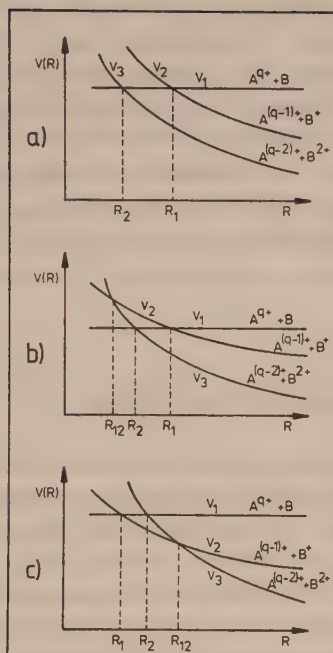
Der Faktor b_{ij} besitzt i.a. einen Wert zwischen 0 und 1. Zum einen können mit dem Faktor die Auswahlregeln für den Elektroneneinfang erfüllt werden. Ist z.B. der Gesamtspin im einlaufenden Kanal S_j und der im auslaufenden Kanal S_i , dann gilt für den empirischen diabatischen Faktor

$$b_{ij} = \delta_{S_j, S_i}. \quad (2.54)$$

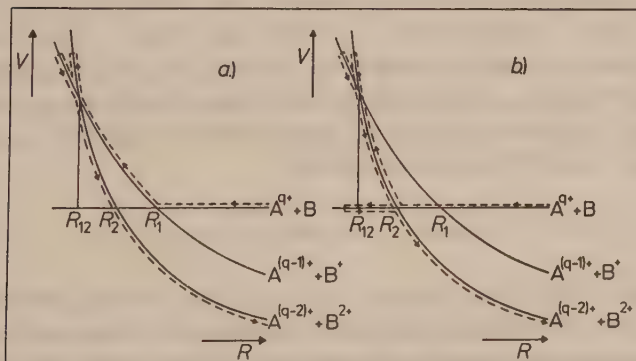
Zum anderen läßt sich mit diesem Faktor die Kopplungsstärke variieren und damit an die experimentellen Ergebnisse anpassen. Wie später im fünften Kapitel noch gezeigt wird, spielt dieser Faktor dort, wo Abweichungen von den normalen Landau-Zener Rechnungen auftreten, die darauf beruhen, daß beim Elektroneneinfang gleichzeitig das Projektil angeregt wird, eine entscheidende Rolle. Da es sich bei der Projektilanregung um einen Zwei-Elektronen-Prozeß handelt, muß A_1 geändert werden, um die Kopplung zwischen den Zuständen (die jetzt schwächer ist) richtig zu beschreiben.

II.3.5 Der Zwei-Elektroneneinfang im Modell der Potentialkurvenkreuzungen

Die Stoßsysteme, bei denen der Einfang von zwei Elektronen möglich ist, werden in der einfachsten Näherung durch drei Potentialkurven beschrieben. Die erste Kurve V_1 beschreibt den einlaufenden Kanal mit dem q -fach geladenen Ion A^{q+} und dem Atom B. Die zweite Potentialkurve V_2 entspricht dem Einfang eines Elektrons und stellt dementsprechend das System $A^{(q-1)+}/B^+$ dar. Die dritte Potentialkurve V_3 repräsentiert das System $A^{(q-2)+}/B^{2+}$ nach dem Einfang von zwei Elektronen. Eine Darstellung dieser drei Kurven ist für unterschiedliche Fälle in Figur 2.8 gezeigt (Janev und Presnyakov 1981). Teil a) beschreibt den speziellen Fall, bei dem sich die Potentialkurven des Ein- und Zwei-Elektroneneinfangs untereinander nicht kreuzen. R_1 und R_2 sind die entsprechenden Kreuzungen mit dem einlaufenden Zustand. Der Zwei-Elektroneneinfang kann nur durch einen gleichzeitigen Übergang von zwei Elektronen an der Kreuzung R_2 erfolgen. Diese relative Anordnung der drei Potentialkurven, bei der V_2 und V_3 keinen Schnittpunkt besitzen, tritt auf, wenn z.B. das Ion A^{q+} dreifach geladen ist. In Teil b) ist der am häufigsten anzutreffende Fall dargestellt. Die Potentialkurven des Ein- und Zwei-Elektroneneinfangs besitzen untereinander einen Kreuzungspunkt R_{21} . Der Einfang von zwei Elektronen kann nun auf zwei verschiedene Arten geschehen: Zum einen können beide Elektronen



Figur 2.8 Potentialkurven für den Zwei-Elektroneneinfang. In a) ist nur der simultane Einfang bei R_2 möglich, b) und c) erlauben die Möglichkeiten des direkten Prozesses bei R_2 und des Stufenprozesses bei R_1 und R_{12} .



Figur 2.9 Mechanismen des Zwei-Elektronentransfers. a) Stufenprozeß ; b) simultaner Einfang. Die gestrichelte Linie verdeutlicht den Weg des molekularen Systems.

gleichzeitig bei R_2 eingefangen werden, zum anderen ist ein Stufenprozeß möglich. Hierbei wird jeweils ein Elektron bei R_1 und R_2 eingefangen. Diese beiden Mechanismen des Zwei-Elektroneneinfangs sind in Figur 2.9 noch einmal zur Verdeutlichung dargestellt. Die gestrichelte Linie gibt den Weg des molekularen Systems während des Stoßes an. Teil c) von Figur 2.8 beschreibt die Situation, daß sich die Kreuzung R_2 bei einem größeren Kernabstand befindet als die Kreuzungen R_1 und R_2 . Auch in diesem Fall sind sowohl der simultane Einfang als auch der Stufenprozeß möglich.

II.3.6. Kopplungsstärke für den Zwei-Elektroneneinfang

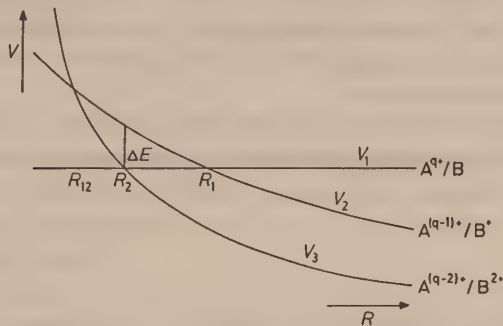
Für die Beschreibung von Übergängen zwischen molekularen Zuständen, die den Einfang von zwei Elektronen repräsentieren, gibt es weitaus weniger theoretische Ansätze als für den Transfer eines einzelnen Elektrons. Dies hat seine Ursache darin, daß die Beschreibung von Umladungsprozessen in Mehr-Elektronen-Targets (mindestens zwei Elektronen) mindestens vier Teilchen berücksichtigen muß und deshalb nur mit Näherungsmethoden durchführbar ist. Die Darstellung des simultanen Elektronenübergangs durch Konfigurationswechselwirkung erfordert die Kenntnis des Matrixelements H_{12} , welches die Aufspaltung der adiabatischen Potentialkurven U_1 des Eingangskanals A^{q+}/B und U_2 des Ausgangskanals $A^{(q-2)+}/B^{2+}$ für $R = R_k$ beschreibt (s. Gleichung 2.14). Janev et al. (1985) geben einen analytischen Ausdruck für die Aufspaltung dieser Potentialkurven an:

$$\Delta(R_k) = D(R_k)^* \exp[-(\alpha_1 + \beta_1)R_k] \quad (2.55)$$

($x = (Z_A + Z_B - 1)(1/\alpha_1 + 1/\beta_1 - 5)$; Z_A und Z_B sind die Ladungen des Projektils bzw. die Rumpfladung des Targets; $\alpha_1^2/2$ und $\beta_1^2/2$ sind die Ionisierungsenergien von A und B; D ist eine Konstante, welche von den Quantenzahlen der beteiligten Elektronen, den Ladungen Z_A und Z_B und den Ionisierungsenergien abhängt.) Schon in einfachen Fällen erfordert die Auswertung dieser Gleichung

einen sehr hohen Aufwand. Eine Abschätzung der Größenordnung für die Zwei-Elektronenaustauschkopplung H_{12} wird von Chibisov und Janev (1988) angegeben. Das Matricelement $H_{12}(R_k)$ ist ca ein Zehntel des Matricelements $H_{11}(R_k)$, welches den Ein-Elektronentransfer beim gleichen Kernabstand R_k beschreibt.

Von Barat (s. Roncin et al. 1986) wird zur Beschreibung der Kopplung ein virtueller Übergang vorgeschlagen (s. Figur 2.10). Das System wechselt am Kreuzungspunkt R_k auf die Potentialkurve V_2 des Ein-Elektroneneinfangs und von dort aus beim selben



Figur 2.10 Zwei-Elektroneneinfang nach dem Modell von Barat et al.

Kernabstand auf das Potential V_2 des Ausgangskanals. Die Kopplung für diesen Prozeß wird in einer Störungsrechnung durch die Kopplungen H_{12} und H_{23} der entsprechenden Ein-Elektronentransfer-Prozesse zu

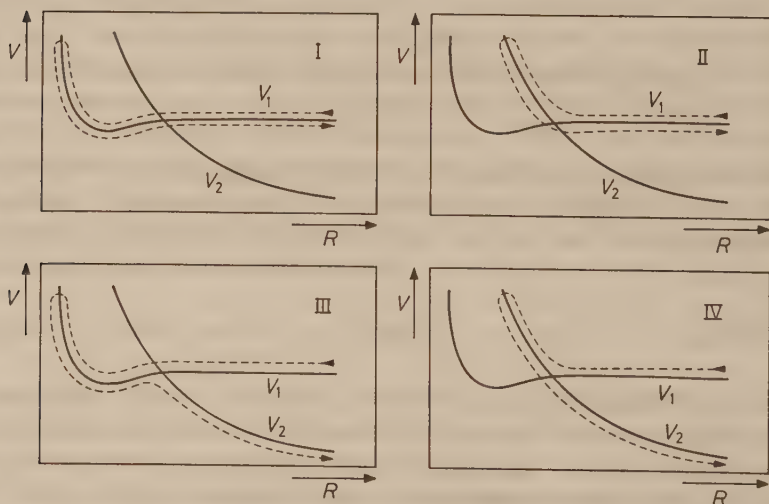
$$H_{13}(R) = H_{12}(R) H_{23}(R) / \Delta E \quad (2.56)$$

bestimmt (Laurent et al. 1987), wobei ΔE der Abstand der Potentialkurven V_1 und V_2 am Kreuzungspunkt R_k ist. Bei dieser Behandlung wurde angenommen, daß H_{13} in einer Zwei-Zustands-Näherung (nur die Potentiale V_1 und V_2 werden berücksichtigt) für die direkte Kopplung vernachlässigbar klein ist.

II.4. Differentielle Wirkungsquerschnitte umladender Stöße

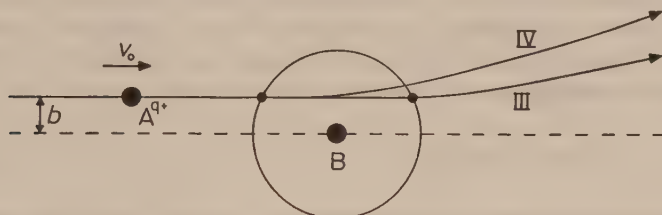
Ein umladender Stoß eines mehrfach geladenen Ions mit einem Atom kann durch zwei Potentialkurven, dem Potential V_1 des einlaufenden Kanals und dem Potential V_2 des Umladungskanals, vereinfacht dargestellt werden. Es lassen sich prinzipiell vier mögliche Streuprozesse unterscheiden (s. Figur 2.11, die Klassifikation stammt von Olson und Smith 1971):

- I) Das System bleibt während des gesamten Stoßes auf der Potentialkurve V_1 .
- II) Beim Erreichen des Kreuzungspunktes macht das System einen Übergang auf das Potential V_2 , beim Auseinanderlaufen wechselt das System wieder zurück in den Anfangszustand.
- III) Der Elektroneneinfang findet beim zweiten Durchlaufen der Kurvenkreuzung statt.
- IV) Beim ersten Erreichen der Kreuzung wird das Elektron eingefangen, das zweite Mal wird die Kreuzung diabatisch durchlaufen.



Figur 2.11 Klassifikation der vier möglichen Streuprozesse eines Zwei-Zustandssystems (nach Olson und Smith 1971).

Die Prozesse I und II beschreiben die elastische Streuung. III und IV beschreiben die beiden möglichen Wege der Umladung, welche auch schon bei der Behandlung der Umladungswahrscheinlichkeit nach Landau und Zener auftraten. Bei der Analyse winkeldifferentieller Streuquerschnitte muß zwischen diesen beiden Wegen unterschieden werden. In langsamen Stößen kann die Kernbewegung von der Elektronenbewegung separiert und durch die klassische Trajektorie $\underline{R}(t)$ beschrieben werden. In Figur 2.12 ist



Figur 2.12 Schematische Darstellung des Stoßes. Das Projektil erreicht den Kreuzungsradius zweimal. Erfolgt die Umladung beim ersten Mal, so wird die resultierende Ablenkung größer.

schematisch dargestellt, wie die Streuprozesse III und IV bei gleichem Stoßparameter b zu unterschiedlichen Streuwinkeln führen. Die Umladung am ersten Kreuzungspunkt führt dazu, daß die abstoßende Coulombkraft sofort wirksam wird. Die Ablenkung wird hier größer als im Fall III, wo erst nach dem Punkt der größten Annäherung das Elektron eingefangen wird und damit die Wirkung des abstoßenden Potentials erst später einsetzt.

II.4.1. Klassische Ablenkfunktion

Die Ablenkfunktion $\Theta(b)$ gibt den Streuwinkel Θ des Projektils für eine feste Stoßenergie als Funktion des Stoßparameters b an. Zur Bestimmung von $\Theta(b)$ genügt die Kenntnis des Potentials $V(\underline{R}(t))$ entlang der Bahn des Projektils. Für einen Zwei-Körper-Stoß läßt sich das Problem mit reduzierten Variablen als Bewegung in einem Zentralfeld beschreiben. Der Drehimpuls

$$L = b (2 \mu E_{\text{SP}})^{1/2} \quad (2.57)$$

und die Gesamtenergie

$$E_{\text{ges}} = V(\underline{R}) + E_{\text{kin}}(\underline{R}) \quad (2.58)$$

sind Erhaltungsgrößen der Bewegung (s. z.B. Goldstein 1981). μ ist die reduzierte Masse $m_1 * m_2 / (m_1 + m_2)$, E_{SP} ist die Stoßenergie im Schwerpunktsystem. Die gesuchte Funktion $\Theta(b)$ ergibt sich aus den Erhaltungssätzen zu

$$\Theta(b) = \pi - \int_{\underline{R}(t)} (2\mu E_{\text{SP}} / L^2 - 2\mu V(\underline{R}) / L^2 - 1/R^2)^{-1/2} R^2 dR, \quad (2.59)$$

wobei die Integration über die Bahn des Projektils erfolgt. Diese Gleichung besitzt nur für spezielle Formen von $V(\underline{R})$ eine analytische Lösung. Bei bekanntem Potential ist eine numerische Auswertung möglich. Eine weitere Möglichkeit zur Bestimmung der klassischen Ablenkfunktion ist die iterative Lösung der Bewegungsgleichung

$$\underline{R}(t+dt) = \underline{R}(t) + (d\underline{R}(t)/dt) \Delta t + 1/2 (d^2 \underline{R}(t)/dt^2) \Delta t^2, \quad (2.60)$$

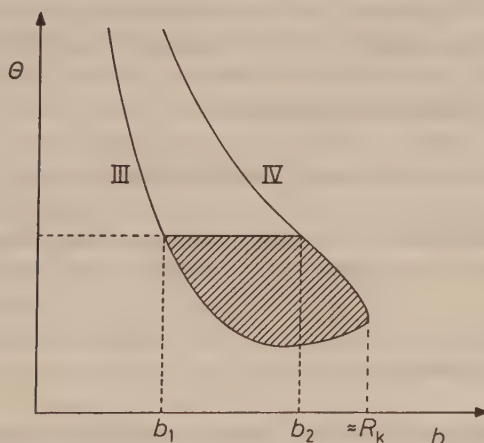
die sich bei bekanntem Potential leicht mit Hilfe eines Computers durchführen läßt. Ist $\underline{v}_0 = (v_x, 0)$ die vorgegebene Anfangsgeschwindigkeit in kartesischen Koordinaten, dann ergibt sich der Streuwinkel im Schwerpunktsystem zu

$$\Theta_{\text{SP}} = \arctan(v_y^E, v_x^E) \quad (2.61)$$

(mit v_y^E, v_x^E : kartesische Geschwindigkeitskomponenten nach dem Stoß), welcher sich gemäß

$$\tan \Theta_{\text{ab}} = \sin \Theta_P / (\cos \Theta_P + m_A v^A / m_B v^E) \quad (2.62)$$

(Johnsen 1982) in Laborkoordinaten transformiert (m_A und m_B : Massen von Projektil und Target, v^A und v^B : Anfangs- und Endgeschwindigkeit des Projektils). Der Elektroneneinfang wird durch einen Wechsel des (zur Berechnung der Beschleunigung benutzten) Potentials am Kreuzungspunkt simuliert. Figur 2.13 zeigt eine schematische Darstellung der klassischen Ablenkfunktion. Die beiden unterschiedlichen Möglichkeiten der Umladung



Figur 2.13 Klassische Ablenkfunktion für einen inelastischen Stoß mit Elektroneneinfang. Die Numerierung der Äste mit III und IV entspricht der Klassifizierung von Olson und Smith (1971). Die schraffierte Fläche ist proportional zur Phasendifferenz zwischen den Streuamplituden mit gleichem Streuwinkel aber unterschiedlichem Stoßparameter (s. Kapitel II.4.2.).

(III und IV) führen zu zwei verschiedenen Zweigen der Ablenkfunktion, welche für tangentielle Stöße ($b \approx R_k$) ineinander übergehen, da die Trajektorien zusammenrücken (vgl. Figur 2.12).

II.4.2. Klassische und semiklassische differentielle Wirkungsquerschnitte

Für beide Zweige der Ablenkfunktion wird der Streuwinkel durch die Wahl des Stoßparameters festgelegt. Wenn der einlaufende Teilchenflußdichte I ist, der Stoßparameter zwischen b und $b+db$ und der Azimutalwinkel im Bereich von Φ bis $\Phi + d\Phi$ liegt, dann werden $I b db d\Phi$ Teilchen in den Raumwinkel $d\Omega = \sin\theta d\theta d\Phi$ gestreut, so daß sich der differentielle Wirkungsquerschnitt zu

$$d\sigma/d\Omega = b db / \sin\theta d\theta \quad (2.63)$$

ergibt. Da der Streuprozess isotrop im Azimutalwinkel Φ ist, kann der Raumwinkel-differentielle Wirkungsquerschnitt $d\sigma/d\Omega$ in den Wirkungsquerschnitt $d\sigma/d\theta$, welcher nur noch differentiell im Streuwinkel θ ist, transformiert werden. Es gilt folgende Beziehung für den totalen Wirkungsquerschnitt:

$$\int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} (d\sigma/d\Omega) d\Omega = \sigma_{\text{total}} = \int_0^{\pi} (d\sigma/d\theta) d\theta. \quad (2.64)$$

Mit dem Raumwinkelement $d\Omega = \sin\theta d\theta d\Phi$ und der Integration der linken Seite von Gleichung 2.64 ergibt der Vergleich der Integranden

$$d\sigma/d\theta = 2\pi b (|d\theta/db|)^{-1} \quad (2.65)$$

(s. auch Landau und Lifschitz 1969). Der klassische differentielle Wirkungsquerschnitt ist nun die Summation über alle Anteile mit unterschiedlichem Stoßparameter b_i , welche zum gleichen Streuwinkel θ führen:

$$(d\sigma/d\theta)^{\text{klass}} = \sum_i 2\pi b_i (|d\theta_i(b)/db_i|_{\theta})^{-1}. \quad (2.66)$$

Zusätzlich wird dabei noch die Ablenkfunktion $\theta_i(b)$ unterschieden.

Eine genauere Bestimmung der absoluten Werte der Wirkungsquerschnitte erfolgt unter Berücksichtigung der Landau-Zener

Wahrscheinlichkeiten an den Kreuzungspunkten. Aus Gleichung 2.66 ergibt sich dann:

$$(d\sigma/d\theta)^{\text{klass.}, L, Z} = \sum_1 2\pi b_1 (|d\theta_1/db_1|_0)^{-1} p_1 (1-p_1). \quad (2.67)$$

Im quantenmechanischen Bild dürfen nicht die Wirkungsquerschnitte addiert werden, sondern es muß eine kohärente Addition der Streuamplituden durchgeführt werden (s. auch Danared und Barany 1986). Die quantenmechanische Streuamplitude besitzt einen Phasenfaktor $\exp[iA/\hbar]$, wobei A das Wirkungsintegral entlang der Bahn ist (Smith 1965). Für die Streuamplitude der von einem Zweig der Ablenkfunktion gestreuten Teilchen mit dem Stoßparameter b_1 ergibt sich dann:

$$f_1 = (p_1 (1-p_1) (d\sigma/d\theta)_1^{\text{klass.}})^{1/2} \exp[iA_1/\hbar]. \quad (2.68)$$

Die unterschiedlichen Streuamplituden weisen eine Phasenverschiebung $\Phi = i (A_1 - A_2) / \hbar$ auf. Der semiklassische differentieller Wirkungsquerschnitt berechnet sich als Quadrat der Summe der Streuamplituden und besitzt aufgrund der Phasenverschiebung einen Interferenzterm:

$$\begin{aligned} (d\sigma/d\theta)^{\text{sk}} &= |f_1 + f_2|^2 = \\ &= p_1 (1-p_1) (d\sigma/d\theta)_1^{\text{klass.}} + p_2 (1-p_2) (d\sigma/d\theta)_2^{\text{klass.}} \\ &+ 2 [p_1 (1-p_1) p_2 (1-p_2) (d\sigma/d\theta)_1^{\text{klass.}} (d\sigma/d\theta)_2^{\text{klass.}}]^{1/2} \cos \Phi. \end{aligned} \quad (2.69)$$

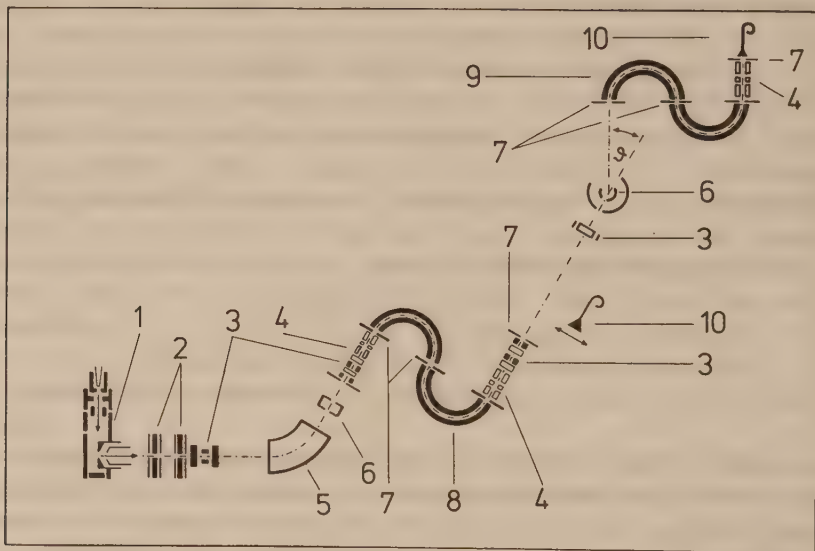
Die durch den Interferenzterm hervorgerufenen Strukturen im differentiellen Wirkungsquerschnitt werden als Stueckelberg-Oszillationen (Stueckelberg 1932) bezeichnet. Für die Bestimmung der Phase A_1 hat Smith (1965) die Beziehung

$$dA_1 = -L_1 d\theta \quad (2.70)$$

angegeben. Die Auswertung dieser Gleichung zeigt, daß sich die Phasendifferenz bis auf den Faktor $(2\mu E_F)^{1/2}$ als Fläche zwischen den Ablenkfunktionen (schraffierte Fläche in Figur 2.13) ergibt.

III. EXPERIMENT

Für die experimentellen Untersuchungen stand ein Translationsenergie-Spektrometer zur Verfügung. Dieses wurde modifiziert, so daß Messungen in Abhängigkeit vom Streuwinkel der Projektionen ermöglicht wurden. Den Aufbau der Meßapparatur zeigt Figur 3.1. Eine ausführliche Beschreibung der Ionenquelle und der Analysatorsysteme findet sich bei Kahlert (1983) und Kahlert et al. (1985). Im folgenden wird die Apparatur nur kurz in ihrer prinzipiellen Funktionsweise dargestellt. Eine detaillierte Beschreibung des winkelauflösenden Teils folgt im nächsten Kapitel.

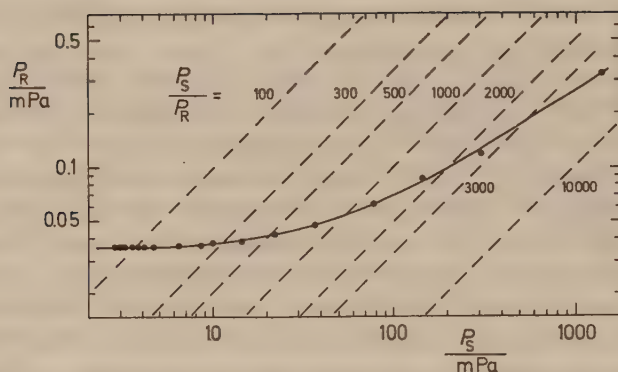


Figur 3.1 Winkelauflösendes Translationsenergie-Spektrometer: 1-Ionenquelle; 2-Einzellinse; 3-Ablenkplatten; 4-Zoomlinsen; 5-Magnetisches Sektorfeld; 6-Stoßzelle; 7-Blenden; 8-Energiemonochromator; 9-Energieanalysator; 10-Channeltron

Die mehrfach geladenen Ionen werden in einer Ionenquelle durch Elektronenstoß erzeugt, extrahiert und mit einer Spannung von

normalerweise 200 V beschleunigt. Die Beschleunigungsspannung legt die Stoßenergie im Laborsystem fest. Hinter der Ionenquelle befinden sich zwei Einzellinsen zur Fokussierung, sowie Ablenkplattenpaare zur Richtungskorrektur des Ionenstrahls. Aus den in der Ionenquelle erzeugten Ladungszuständen wird in einem magnetischen Sektorfeld der für das Experiment benötigte Ladungszustand selektiert. Die Ionen durchlaufen eine erste Targetgaszelle, in welcher durch eine Umladungsreaktion oder einen An- bzw. Abregungsprozeß Ionen in ihrem elektronischen Zustand präpariert werden können (Huber 1987). Anschließend passieren die Ionen einen Energiemonochromator; dieser besteht aus zwei 180°-Kugelkondensatorsystemen. Im Eingang und Ausgang dieses Systems sind jeweils vier Ablenkplattenpaare sowie eine Zoomlinse angeordnet. Mit dem Monochromator läßt sich die energetische Halbwertsbreite ΔE des Strahls einstellen. Die Auflösung des Systems $E/\Delta E$ (E ist die kinetische Energie der auf der Sollbahn transmittierten Ionen) wurde experimentell zu 550 bestimmt (s. Kahlert 1983). Durch Abbremsen der Ionen in der Zoomlinse vor dem Monochromator und anschließendem Beschleunigen in der zweiten Zoomlinse, sinkt die Transmissionsenergie und das effektive Auflösungsvermögen steigt, d. h. die energetische Halbwertsbreite des Ionenstrahls nimmt ab.

Eine weitere Präparation der Ionen bezüglich der Winkeldivergenz des Strahls geschieht in einer anschließenden Driftstrecke (ca 0.5 m) bevor die Ionen in die zweite Stoßzelle gelangen, wo die eigentliche Umladungsreaktion mit dem Targetgas stattfindet. Ablenkplattenpaare in vertikaler und horizontaler Richtung, welche sich ca 10 cm vor dem Eintrittsloch der Stoßzelle befinden, erlauben eine letzte Feinkorrektur der Strahlrichtung. Die Stoßzelle ist differentiell gepumpt, um den Restgasdruck im Rezipienten möglichst gering zu halten und damit die Umladungsprozesse auf den Bereich der Stoßzelle (Durchmesser 1 cm) zu begrenzen. Figur 3.2 zeigt eine Messung des Drucks im Rezipienten als Funktion des Targetgasdrucks (hier He) in der Stoßzelle. Die gestrichelten Linien geben bestimmte Verhältnisse dieser Drucke an. Bei kleinem Targetgasdruck ist der Druck im Rezipienten nur durch die Abdampfrate und die Leckrate bestimmt (der bei den



Figur 3.2 Messung des Restgasdrucks im Rezipienten p_R als Funktion des Targetgasdrucks p_S .

Umladungsmessungen erreichte Druck war um den Faktor 10 besser; die für Figur 3.2 durchgeführte Messung entstand kurz nach Fertigstellung des Experiments). Bei hohem Targetgasdruck ist das Verhältnis besser als 1000 und konvergiert gegen einen Wert von 10^4 , der die gute Wirkung des differentiellen Pumpens demonstriert.

Das Eingangsloch der Stoßzelle hat einen Durchmesser von 1 mm, an der Ausgangsseite ist ein horizontaler, 1 mm breiter Spalt vorhanden, damit die in der horizontalen Ebene gestreuten Ionen die Stoßzelle verlassen können. Die Energieanalyse der Reaktionsprodukte erfolgt in einem zweiten doppelten 180° -Kugelkondensatorsystem; die Ionen werden mit Hilfe eines Channeltrons einzeln nachgewiesen.

III.1. Prinzip der Translationsenergie-Spektroskopie

Mit dem Experiment lassen sich die kinetischen Energien der primären und umgeladenen Ionen bestimmen. Zur Verdeutlichung des Zusammenhangs zwischen diesen Größen und den zu bestimmenden Größen, wie z.B. der Anregungsenergie des Projektilions nach dem Stoß, ist im folgenden die Kinematik der Umladungsprozesse kurz beschrieben.

Der inelastische Stoß läßt sich durch den Energiesatz

$$E_A + E_B + \Delta E = E_A' + E_B' \quad (3.1)$$

und den Impulssatz

$$p_A + p_B = p_A' + p_B' \quad (3.2)$$

beschreiben. Die Indizes A und B gelten für das Projektilion bzw. für das Targetatom. Die ungestrichene Größen geben die kinetischen Energien und Impulse vor dem Stoß an, die gestrichene Größen gelten nach dem Stoß. ΔE ist der Energiedefekt (= Gewinn an kinetischer Energie) der Reaktion. Bei den experimentellen Untersuchungen befindet sich das Target vor dem Stoß in Ruhe ($E_B = 0 = p_B$), und die Projektilenergie E_A ist durch das Experiment vorgegeben. Bei der Methode der Translationsenergie-Spektroskopie wird die kinetische Energie des Projektilions nach dem Elektroneneinfang gemessen, wobei der Streuwinkel θ im Laborsystem festgelegt ist ($\theta \approx 0^\circ$). Durch die Messung wird daher die Größe

$$Q = E_A' - E_A, \quad (3.3)$$

der Energiegewinn des Projektils, direkt bestimmt. Der Zusammenhang zwischen dem Energiedefekt der Reaktion und dem Energiegewinn des Projektils ergibt sich durch Lösen der Gleichungen 3.1 und 3.2 mit den Bedingungen $E_B = 0$ und $p_B = 0$ zu

$$Q = E_A \{ m_A^2 / (m_A + m_B)^2 (\cos \theta + [x - \sin^2 \theta]^{1/2})^2 - 1 \}, \quad (3.4)$$

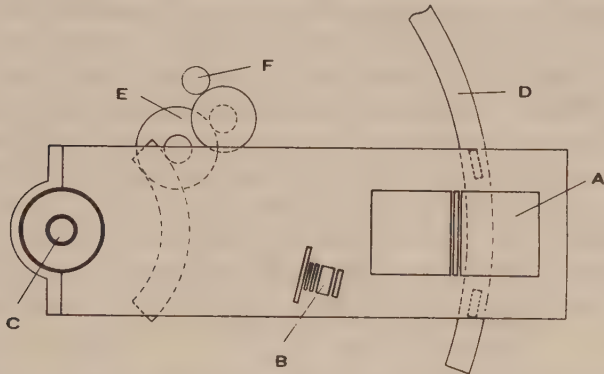
mit der Abkürzung $x = m_b^2 (E_{SP} + \Delta E) / (m_A^2 E_{SP})$. E_{SP} ist die Stoßenergie im Schwerpunktsystem: $E_{SP} = m_b / (m_A + m_b) E_A$ (vgl. Huber 1976). Es gibt einen eindeutigen Zusammenhang zwischen dem gemessenen Energiegewinn des Projektils und dem Energiedefekt der Reaktion, der sich daher bei Kenntnis des Streuwinkels bestimmen läßt. Eine Analyse von Gleichung 3.4 zeigt, daß für einen Streuwinkel von 0° fast der gesamte Energiedefekt der Reaktion auf das Projektil übertragen wird, so daß sich ΔE direkt durch Messung der kinetischen Energie des Projektils bestimmen läßt. Beim Einfang des Elektrons gewinnt das System die Rekombinationsenergie E_R , die Anregungsenergie E^* des Zustands, in den das Elektron eingefangen wird, und die Ionisierungsenergie I des Targets müssen aufgewendet werden. Die Differenz dieser Energien ist gleich dem Energiedefekt der Reaktion:

$$E_R - E^* - I = \Delta E + E_m. \quad (3.5)$$

E_m berücksichtigt noch die Anregungsenergie eines möglicherweise vorhandenen metastabilen Projektilzustands, die dem System ebenfalls zur Verfügung steht. Da die Ionisierungsenergien bekannt sind (Moore 1970), läßt sich durch Messung des Q -Wertes der Energiedefekt der Reaktion und damit durch Vergleich mit den tabellierten Anregungsenergien (Bashkin und Stoner 1978, Moore 1971) der Endzustand des Projektil- oder Targetions (bzw. auch der ursprüngliche Projektilzustand) bestimmen.

III.2. Winkelaufgelöste Messung von Translationsenergiespektren

Der Energieanalysator ist zur Variation des Nachweiswinkels auf einer um das Zentrum der zweiten Stoßzelle drehbar gelagerten Platte montiert (Figur 3.3). Als Drehlager dient ein um die Stoßzelle fassendes Gleitlager, das andere Ende der Platte läuft mit Rollen auf einer konzentrisch um die Stoßzelle angeordneten Schiene. Die Drehbewegung wird von einer Drehdurchführung und



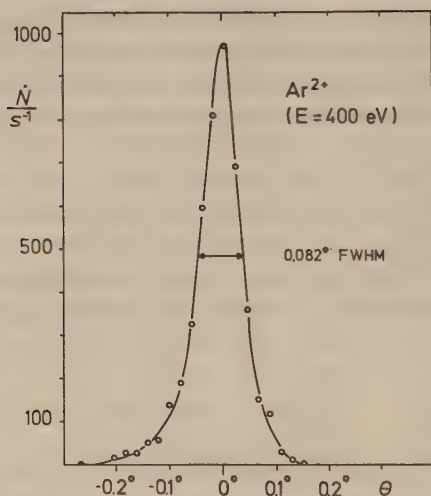
Figur 3.3 Schematische Darstellung der drehbaren Montageplatte mit den Detektorsystemen.

A: Doppeltes 180°-Kugelkondensatorsystem, senkrecht zur Streuebene montiert; B: Gegenfeldanalysator; C: Stoßzelle; D: Laufschiene; E: Getriebe; F: Drehdurchführung;

einem Getriebe (Untersetzung 9:1) übertragen. Dieses Getriebe befindet sich im Vakuum, um das mit der Durchführung zu übertragende Drehmoment möglichst klein zu halten. Die Drehdurchführung wird durch einen Schrittmotor mit Getriebe (Untersetzung 5:1) angetrieben. Die sich im Vakuum befindenden Rollen, sowie die Lagerschale des Gleitlagers sind aus selbstschmierendem Metall (sog. Deva-Metall, Hersteller ist die gleichnamige Firma) gefertigt, welches gute UHV-Eigenschaften besitzt.

Die Winkelauflösung der gesamten Apparatur wird im wesentlichen durch die Winkeldivergenz des primären Ionenstrahls und die Winkelakzeptanz des Nachweissystems festgelegt. Die Divergenz

wird durch die Driftstrecke (0.5 m) zwischen Monochromator und Stoßzelle, sowie den Durchmesser der Eingangsblende der Stoßzelle (1 mm) bestimmt. Die Akzeptanz des Analysators hängt von dessen



Figur 3.4 Primäres Ar²⁺-Strahlprofil. Die Halbwertsbreite der gemessenen Winkelverteilung ist 0.082°.

Eingangsblendendurchmesser (0.5 mm) und seinem Abstand vom Streuzentrum (≈ 30 cm) ab. Figur 3.4 zeigt eine Messung der Winkelverteilung eines Ar²⁺-Strahls. Die Halbwertsbreite von 0.082° ergibt sich aus der Faltung der Strahldivergenz mit der Winkelakzeptanz des Analysators.

III.2.1. Datenerfassung und Steuerung des Experiments

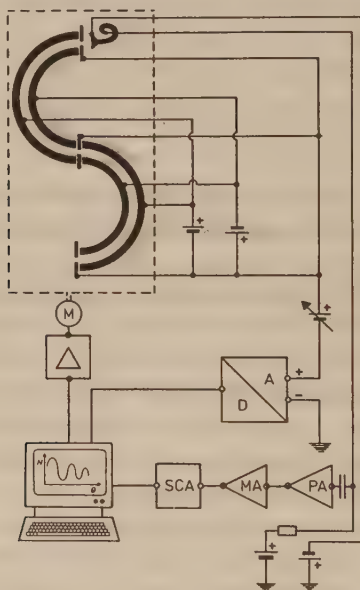
Die Meßwertaufnahme und Steuerung der dazugehörenden Parameter (Energie und Streuwinkel der nachgewiesenen Ionen) erfolgt mit einem Apple IIe Personal-Computer. Dieser verfügt über eine 10 bit-DAC-Karte, mit welcher eine Gleichspannung von 0..8 V erzeugt werden kann. Diese Gleichspannung wird der Abbremsspannung vor dem Energieanalysator überlagert. Beim Durchfahren der Spannung wird ein äquivalentes Energieintervall für die nachgewiesenen Ionen durchfahren. Die Zählrate als Funktion der Kanalnummer (diese ist proportional der am Ausgang des DACs anliegenden Spannung) gibt ein Spektrum der Intensität in Abhängigkeit von der Translationsenergie der Ionen. Zum Zählen der vom Channeltron erzeugten Pulse werden diese mit einem ladungsempfindlichen Vorverstärker und einem Spektroskopie-Verstärker verstärkt und geformt und mit einem auf der DAC-Karte integrierten Counter gezählt. Durch sorgfältige Einstellung eines Diskriminators (leading-edge) ließ sich die Dunkelpulsrate auf weniger als 1 Puls/min senken.

Die Ansteuerung des Schrittmotors wird mit Hilfe der TTL-Ausgänge des PCs durchgeführt. Mit den TTL-Pegeln werden Treiberstufen angesteuert, welche den Spulenstrom (550 mA) liefern. Im Halbschrittbetrieb ergibt sich eine effektive Winkelverstellung von $0.00417^\circ/\text{Schritt}$.

Mit Hilfe der Winkelverstellung sind zwei prinzipielle Meßverfahren möglich. Zum einen kann ein bestimmter Winkel eingestellt und ein Translationsenergiespektrum aufgenommen werden; zum anderen kann die Winkelverteilung (der differentielle Wirkungsquerschnitt) für einen bestimmten Reaktionskanal gemessen werden. Hierzu wird die energetische Lage dieser Reaktion im Spektrum unter einem Streuwinkel von 0° bestimmt und der entsprechende Kanal des DACs eingestellt. Durch Abfahren des Winkels bei gleichzeitiger Registrierung der Pulse wird die Winkelverteilung gemessen. Die Winkelspektren wurden mit maximal 48 Kanälen/Grad gemessen. Bei dieser Art der Messung muß beachtet werden, daß sich der Energiegewinn des Projektilions mit dem

Streuwinkel ändert. Die Einstellung des DACs muß also in Abhängigkeit vom aktuell eingestellten Streuwinkel korrigiert werden. Hierzu wurde ein Pascal-Programm entwickelt, welches die Winkereinstellung, die Energiekorrektur und das Zählen der Pulse durchführt.

Zur Verbesserung der Zählstatistik und zum Ausgleich von Schwankungen der Primärstrahlintensität wird nur eine kurze Zeit bei jeder Winkelstellung gemessen. Ein Winkelspektrum entsteht durch mehrmaliges Scannen des Winkelbereichs und Addieren der Ereignisse eines Kanals. Hierbei tritt das Problem auf, daß durch die Konstruktion des Verstellmechanismus ein Getriebeispiel auftritt. Zur Vermeidung von Einstellfehlern wird der Winkelbereich bei der Messung immer nur in einer Richtung abgefahren.



Figur 3.5 Anschluß des Apple IIe an das Experiment. Die Einstellung der Energie erfolgt durch einen 10 bit-Analog-Digital-Konverter, die Pulse werden mit einem Counter gezählt. Die TTL-Ausgänge des Rechners steuern die Treiber für die Spulenwicklungen des Schrittmotors an.

Das Zurückfahren zur Anfangsposition wird folgendermaßen durchgeführt: Es wird eine Sollposition angefahren, die ca 0.5° (120 Schritte) vor der Anfangsposition liegt, anschließend wird die Drehrichtung des Schrittmotors für die gleiche Schrittzahl umgekehrt. Durch diese Vorgehensweise wird das Spiel herausgedreht und die Winkelverstellung bei der Messung erfolgt immer kraftschlüssig. Zum Test der richtigen Funktion dieser Methode wurde z.B. das in Figur 3.4 gezeigte Primärstrahlprofil gemessen. Das Maximum der Zählrate als Funktion des Winkels läßt sich sehr genau bestimmen. Anschließend wurden mehrere Einstellungen größerer und kleinerer Winkel vorgenommen. Eine erneute Messung des Primärstrahlprofils zeigte im Rahmen der Genauigkeit von $\approx 0.01^\circ$, mit der sich das Maximum festlegen ließ, keine abweichende Lage. Figur 3.5 zeigt zusammenfassend das Schema für die Steuerung der Parameter Energie und Nachweiswinkel durch den Computer.

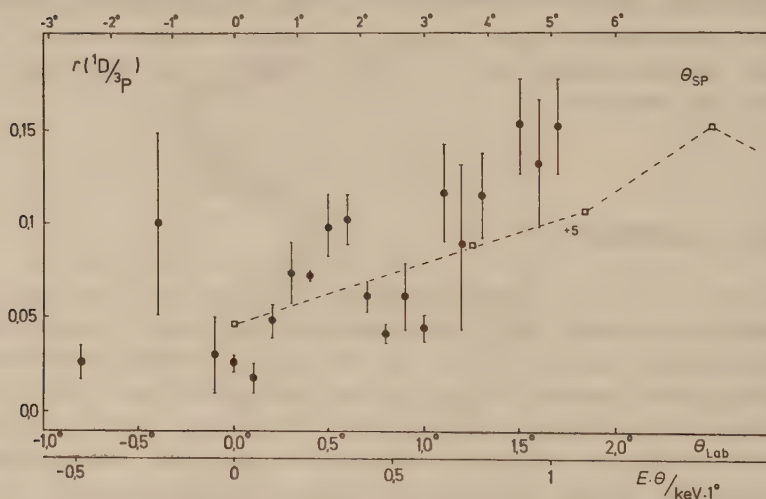
III.3. Testmessungen

Zum Test der neu aufgebauten Nachweiseinheit zur Messung von Winkelverteilungen wäre ein Vergleich mit hoch aufgelösten Winkelverteilungen (eventuell mit Strukturen) anderer Experimente wünschenswert gewesen. Diese liegen jedoch nicht vor. Zum einen existieren erst wenige Messungen z.B. von Roncin et al. (1986), die jedoch bei höheren Stoßenergien und in Stoßsystemen aufgenommen wurden, welche hier nicht untersucht werden können (Ladungszustände $q \geq 6$, $E = 3 q \text{ keV}$). Zum anderen wurden von Jellen-Wutte et al. (1985) zwar winkelaufgelöste Messungen der Umladung von Ar^{2+} in Ne durchgeführt, allerdings sind nur Verhältnisse der zustandsselektiven Wirkungsquerschnitte von zwei Reaktionskanälen angegeben. Auch diese Messung wurde bei einer höheren Stoßenergie durchgeführt.

Das reine Winkelauflösungsvermögen beider zitierten Experimente ist vergleichbar mit dem unseres Experiments, jedoch spielt die

Stoßenergie eine entscheidende Rolle, da nur der reduzierte Streuwinkel $\tau = E \cdot \theta$ (Smith 1966) ein gutes Maß für das Auflösungsvermögen darstellt und Experimente bei unterschiedlichen Stoßenergien nur in der reduzierten Winkelvariablen τ vergleichbar sind. Aufgrund der kleineren Stoßenergie unseres Experiments sollten sich hierdurch Vorteile um einen Faktor 5..10 im Auflösungsvermögen ergeben.

Als ein erster Test ist in Figur 3.6 das Verhältnis der zustandsselektiven Wirkungsquerschnitte der durch die Gleichungen

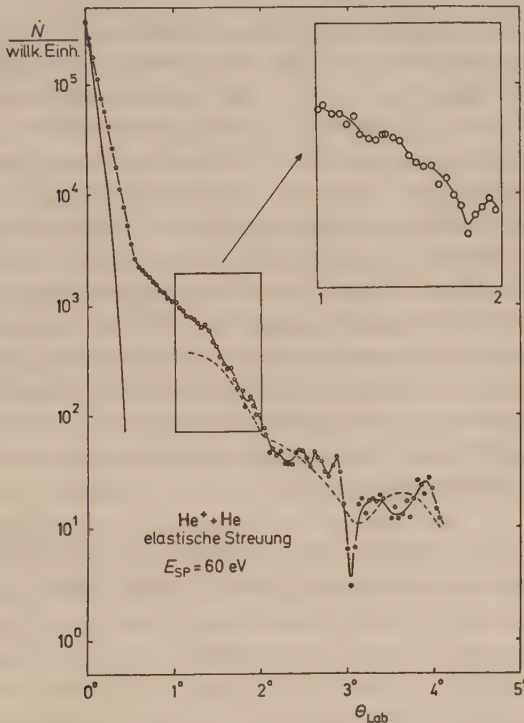


Figur 3.6 Messung von Verhältnissen der zustandsselektiven Wirkungsquerschnitte der Umladungsreaktionen 3.6a und 3.6b. Die obere Skala zeigt den Streuwinkel im Schwerpunktsystem, bezogen auf eine Stoßenergie von 600 eV. Die untere Skala ist der Streuwinkel im Laborsystem bei unserer Messung. Zum Vergleich mit der Messung von Jellen-Wutte et al. zeigt die dritte Skala den reduzierten Streuwinkel $\tau = E \cdot \theta$.

(●) unsere Messung, $\Delta\tau = 0.04 \text{ keV Grad}$;

(□) Jellen-Wutte et al. (1985).

beschriebenen Umladungskanäle in Abhängigkeit vom reduzierten Streuwinkel aufgetragen. Der absolute Wert des Verhältnisses ist in beiden Experimenten stark unterschiedlich; dies ist aber nur von geringer Bedeutung, da die zustandsselektiven Wirkungsquerschnitte stark von der Stoßenergie abhängen, die sich hier um einen Faktor 20 unterscheidet (Verschiebung des Reaktionsfensters!). Der Anstieg der Werte bei wachsendem Streuwinkel wird von beiden Experimenten bestätigt. Unsere Messung zeigt mehr Details, da aufgrund der höheren Auflösung mehr Meßpunkte pro



Figur 3.7 Elastische Streuung von He^+ an He bei $E_{\text{sp}} = 60\text{eV}$. Die Punkte stellen die Meßergebnisse dar, die linke durchgezogene Linie zeigt das Primärstrahlprofil. Die gestrichelte Linie ist eine Messung von Lorents und Aberth (1965). In rechten oberen Teil ist der Bereich von 1° bis 2° vergrößert dargestellt.

Winkelintervall aufgenommen werden konnten. Das Verhältnis der Wirkungsquerschnitte von zwei Reaktionskanälen stellt allerdings keine sehr aussagekräftige Größe dar. Im allgemeinen Fall sollten beide winkeldifferentiellen Wirkungsquerschnitte Strukturen aufweisen. Durch die Verhältnisbildung wird eine Normierung vorgenommen, die nicht mehr entscheiden läßt, welcher Reaktionskanal die oszillatorische Struktur (s. Figur 3.6) besitzt, oder ob es sich sogar um eine Schwebung (aufgrund unterschiedlicher Oszillationsperioden beider Kanäle) handelt.

Für einen weiteren Test der Apparatur wurde die Winkelverteilung der elastischen Streuung in He^+/He -Stößen untersucht; das Ergebnis ist in Figur 3.7 für eine Stoßenergie von 120 eV (durchgezogene Kurve) dargestellt. Die durchgezogene Linie im linken Teil des Bildes zeigt das Profil des Primärstrahls. Die gestrichelt gezeichnete Linie ist die Messung von Lorents und Aberth (1965). Die Übereinstimmung zwischen beiden Messungen ist gut, unsere Messung ist im Bereich kleiner Streuwinkel detaillierter. Die Oszillationen im Wirkungsquerschnitt entstehen durch die Interferenz positiver und negativer Streuwinkel, welche aufgrund der Rotationssymmetrie um die Geradeausrichtung nicht getrennt werden können. Der Regenbogenwinkel ist bei ca 2.8° und die Interferenzstruktur bei größeren Winkeln kann als Gerade-Ungerade-Oszillation zwischen dem Σ_g - und dem Σ_u -Potential des He^+/He -Moleküls interpretiert werden.

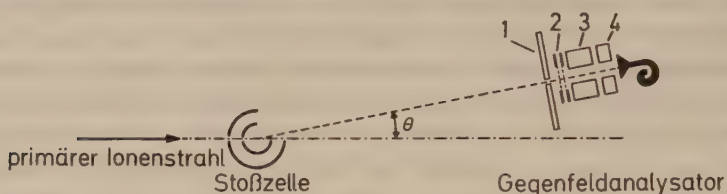
Beide Testmessungen zeigen die korrekte Funktionsweise der Apparatur und demonstrieren die sehr hohe erreichte Winkelauflösung.

III.4. Gegenfeldanalysator

Die hohe Winkelauflösung des Kugelkondensatorsystems, zusammen mit dem Scan-Verfahren für die Energie der nachgewiesenen Teilchen (ein Ion wird detektiert, falls es ein Elektron eingefangen hat und die eingestellte Nachweisenergie gerade dem Energiedefekt dieser Reaktion entspricht) führen zu geringen Sekundärzählraten. Bei der Untersuchung von Zwei-Elektroneneinfang-Prozessen, welche in der Regel kleine Wirkungsquerschnitte, verglichen mit dem Ein-Elektroneneinfang des selben Ions haben, traten daher experimentelle Schwierigkeiten auf. In vielen Fällen erfolgt der Einfang beider Elektronen dominant in einen bestimmten Zustand des Projektils, oder in mehrere dicht benachbarte Zustände der gleichen Hauptquantenzahl. In diesen Fällen enthält eine Messung der Winkelverteilung welche die Energie der nachgewiesenen Ionen nicht unterscheidet nahezu die gleiche Information, da hauptsächlich der dominante Kanal gemessen wird. Der Vorteil einer solchen Messung ist eine stark erhöhte Zählrate sekundärer Ereignisse, welche häufig erst die Messung ermöglicht. Zu diesem Zweck wurde ein Gegenfeldanalysator gebaut, welcher ebenfalls auf der drehbaren Montageplatte befestigt ist und durch 20°-Drehung in die Strahlrichtung gebracht werden kann (vgl. Figur 3.3). Eine schematische Darstellung dieses Analysatorsystems zeigt Figur 3.8. Das eigentliche Gegenfeld liegt zwischen dem Gegenfeldgitter 2 und der Eingangsblende 1 (Durchmesser 0.5 mm) an.

Durch geeignete Wahl des Potentials der Elektrode 4 kann die Ansprechempfindlichkeit des Channeltrons optimiert werden. Dies ist notwendig, da die Kathode des Channeltrons zur Nachbeschleunigung der positiven Ionen stark negativ vorgespannt (-1600 V) ist. Andererseits liegt die Umgebung auf Massepotential, so daß ein starkes elektrisches Feld die beim Auftreffen der Ionen erzeugten Sekundärelektronen aus dem Channeltron herauszieht. Wird nun an Elektrode 4 ein Potential von -1200..-1400V angelegt, so wird dieser Effekt reduziert und die Zählrate steigt. Die Sekundärelektronen werden nun hauptsächlich vom Feld innerhalb des Channeltrons angezogen. Ein weiterer Effekt zur Erklärung der

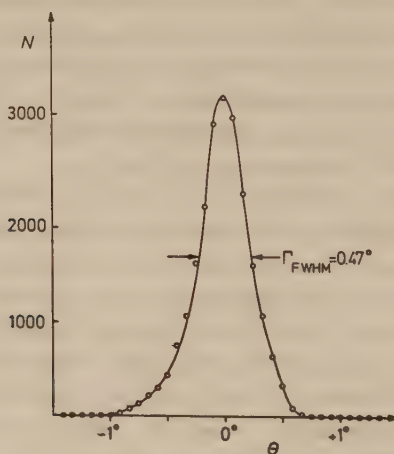
verbesserten Ansprechempfindlichkeit ist die Linsenwirkung dieser Elektrode, was dazu führen kann, daß die Ionen in einem günstigeren Bereich im Trichter des Channeltrons auftreten.



Figur 3.8 Gegenfeldanalysator. Der Abstand zwischen Stoßzelle und Eingangsblende (0.5 mm) beträgt ca 20 cm.

1: Eingangsblende; 2: Gegenfelddblende mit Gitter; 3: Driftrohr (verhindert den Durchgriff vom Potential der Elektrode 4); 4: Elektrode (s. Text)

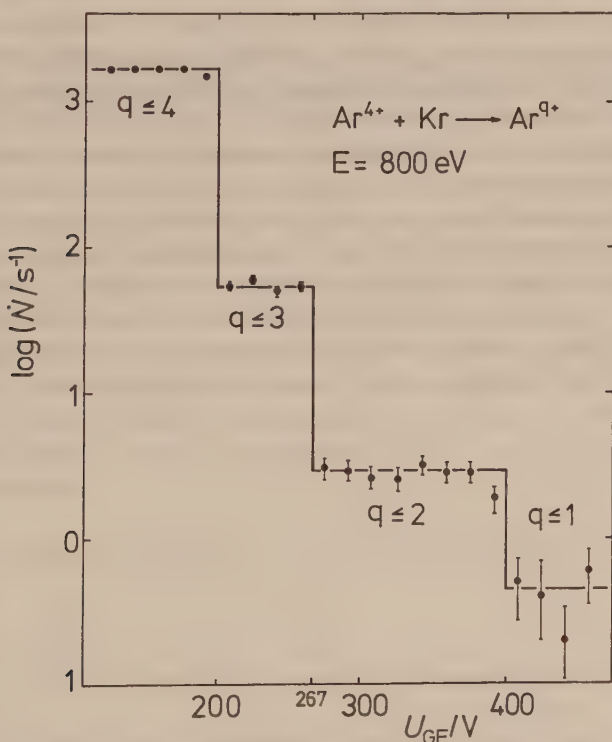
Weitere Vorteile des Gegenfeldanalysators liegen in der Möglichkeit zum Nachweis neutraler Teilchen, einer einfachen Kalibrierung der Targetdicke, sowie der Messung totaler Wirkungsquerschnitte (vgl. Anhang A und B).



Figur 3.9 Ar^{4+} -Strahlprofil bei Messung mit dem Gegenfeldanalysator. Die gesamte Auflösung ist 0.38 keV Grad

Um das Winkelauflösungsvermögen des Gegenfeldanalysators zu testen, wurde ein Ar^{4+} -Primärstrahlprofil (Figur 3.9) aufgenommen. Die Halbwertsbreite beträgt 0.47° bei einer Energie der Ionen von 800 eV. Das Winkel-Auflösungsvermögen ist also um einen Faktor 5..6 schlechter als bei Messung mit dem Halbkugel-Analysatorsystem, aber immer noch relativ hoch verglichen mit anderen Experimenten.

Eine Messung der Zählrate als Funktion der Gegenfeldspannung ist in Figur 3.10 dargestellt. Es handelt sich hierbei um eine Messung der Umladung von Ar^{4+} -Ionen beim Stoß mit Kr-Atomen. Der Verlauf der Zählrate weist charakteristische Stufen auf, die



Figur 3.10 Gegenfeldmessung der Umladung von Ar^{4+} in Kr. Die Bedeutung der Plateaus ist im Text erklärt.

folgendermaßen entstehen: Die erste Stufe bei einer Gegenfeldspannung $U_F = 200$ V entspricht den Ar^{4+} -Primärionen, welche kein Elektron eingefangen haben. Da diese Ionen auf einem Potential von 200 V gebildet wurden und dementsprechend 800 eV kinetische Energie besitzen, können sie eine Gegenspannung von mehr als 200 V nicht überwinden und werden reflektiert. Die Zählrate bei höheren Gegenfeldspannungen entspricht daher dem Nachweis von Ionen in einem niedrigeren Ladungszustand, der durch Umladung im Targetgas entsteht (was sich sehr leicht durch eine Vergleichsmessung ohne Targetgas verifizieren läßt). Die kinetische Energie der durch Umladung entstandenen dreifach geladenen Argonionen ist gleich der primären Energie von 800 eV zuzüglich dem Q -Wert der Reaktion. Bei einer Gegenfeldspannung von ca 270 V werden auch sie reflektiert; nur noch Ionen mit $q \leq 2$ werden nachgewiesen. Bei 400 V Gegenfeldspannung können schließlich nur noch einfach geladene Ionen und neutrale Atome gegen das Feld anlaufen. (Daß es sich in diesem Fall um einen echten Drei-Elektroneneinfang handelt, läßt sich mit der Druckanstiegsmethode überprüfen. Die Zählraten für einen gebildeten Ladungszustand müssen linear mit der Targetdicke ansteigen. Ist dies nicht der Fall, dann liegen doppelte oder mehrfache Stöße vor.) Die genau einem Ladungszustand entsprechenden Ereignisse ergeben sich aus der Differenz benachbarter Plateaus. Für die Winkelverteilung der durch Umladung gebildeten Ionen eines Ladungszustands q' muß daher die Differenz der Winkelspektren für Ionen mit $q \leq q'$ und $q < q'$ gemessen werden.

IV. Winkelverteilung

Die Untersuchungen der Winkelverteilungen umgeladener Ionen hatten die Zielsetzung, den Mechanismus des Zwei-Elektroneneinfangs zu klären. Zu Beginn sollte an einem einfachen Stoßsystem überprüft werden, welche Ergebnisse sich aus den winkeldifferentiellen Messungen und entsprechenden semiklassischen Rechnungen ableiten lassen. Die folgende Analyse zeigt, daß Umladungsreaktionen, die ein sehr einfaches Energiegewinnspektrum aufweisen, bezüglich ihrer differentiellen Wirkungsquerschnitte schon sehr kompliziert werden können.

IV.1 Zustandsselektive differentielle Wirkungsquerschnitte für den Ein-Elektroneneinfang in Ar^{2+}/He -Stößen

Der Ein-Elektroneneinfang im Stoßsystem Ar^{2+}/He wurde bisher von mehreren Autoren (Huber und Kahlert 1983, Lennon et al. 1983, Jellen-Wutte et al. 1985) mit Hilfe der Translationsenergiespektroskopie untersucht, wobei das Ziel dieser Untersuchungen die Identifizierung der Reaktionskanäle war. Dementsprechend wurden diese Messungen unter einem Streuwinkel von 0° ausgeführt. Bezüglich der Bedeutung einzelner Reaktionskanäle ist dieses System vollständig verstanden. Das Energiegewinnspektrum der im Stoß durch Umladung gebildeten Ar^+ -Ionen ist in Figur 4.1 dargestellt. Der Elektroneneinfang läßt sich durch die Gleichungen



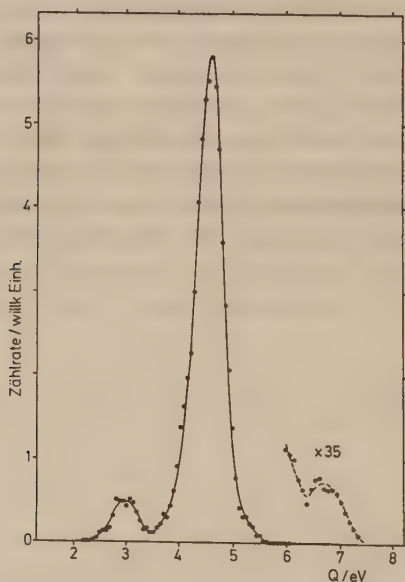
und



beschreiben. Der dominante Reaktionskanal wird durch Ar^{2+} -Projektilionen im ersten metastabilen Zustand ^1D mit einer Anregungsenergie von 1.7 eV erzeugt. Ein kleiner Beitrag vom

zweiten metastabilen Zustand 1S mit einem ΔE -Wert von 7.1 eV ($Q \approx 6.8$ eV) ist ebenfalls im Spektrum erkennbar. Eine Analyse der durch Elektronenstoß erzeugten Ar^{2+} -Ionen zeigt, daß diese sowohl im elektronischen Grundzustand, als auch in den niedrig angeregten metastabilen Zuständen gebildet werden (Wiesemann et al. 1986). Bei hohen Elektronenenergien (verglichen mit der Ionisierungsschwelle) erfolgt die Besetzung dieser Zustände entsprechend ihren statistischen Gewichten. Bei der für die Messung dieser Umladung gewählten Elektronenenergie von $E_{e1} = 500$ eV liegen daher alle Zustände im Primärstrahl vor (die relativen Strahlanteile $f(^3P)$, $f(^1D)$ und $f(^1S)$ betragen 0.60, 0.33, und 0.07).

Im folgenden sollen die winkeldifferentiellen Messungen der durch die Gleichungen 4.1a und 4.1b beschriebenen Einfangkanäle vorgestellt und diskutiert und mit den entsprechenden berechneten Wirkungsquerschnitten verglichen werden.

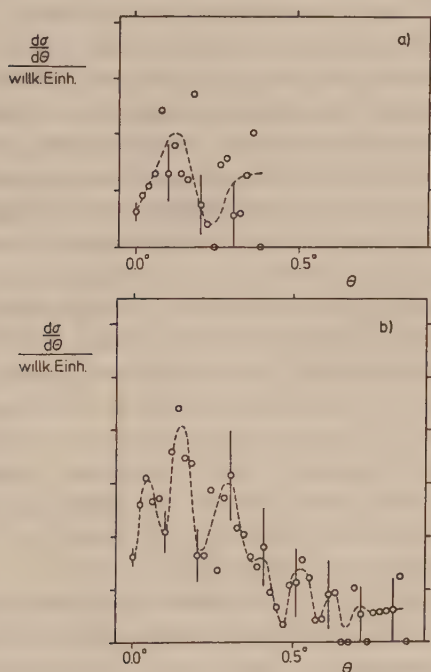


Figur 4.1 Translationsenergiespektrum der in Ar^{2+}/He - Stößen erzeugten Ar^+ -Ionen. ($E = 400$ eV, $E_{e1} = 500$ eV, $\theta = 0^\circ$)

Die experimentellen Ergebnisse sind in den Figuren 4.2a für $\text{Ar}^{2+} (^3\text{P})/\text{He}$ und in Figur 4.2b für das Stoßsystem $\text{Ar}^{2+} (^1\text{D})/\text{He}$ dargestellt. Die Meßwerte sind aufgrund des konstanten Akzeptanzwinkels des Analysators differentiell im Raumwinkel und wurden daher gemäß der Gleichung

$$(d\sigma/d\theta) = 2\pi \sin\theta (d\sigma/d\Omega) \quad (4.2)$$

korrigiert. Die aufgetragenen Werte stellen zustandsselektive Wirkungsquerschnitte dar, welche differentiell im Streuwinkel θ



Figur 4.2 (a) Differentieller Wirkungsquerschnitt für die Reaktionen

a) $\text{Ar}^{2+} (^3\text{P}) + \text{He}(1s^2) \longrightarrow \text{Ar}^+ (^3\text{P}) + \text{He}^+ (1s) + 3.0 \text{ eV}$,

b) $\text{Ar}^{2+} (^1\text{D}) + \text{He}(1s^2) \longrightarrow \text{Ar}^+ (^3\text{P}) + \text{He}^+ (1s) + 4.7 \text{ eV}$.

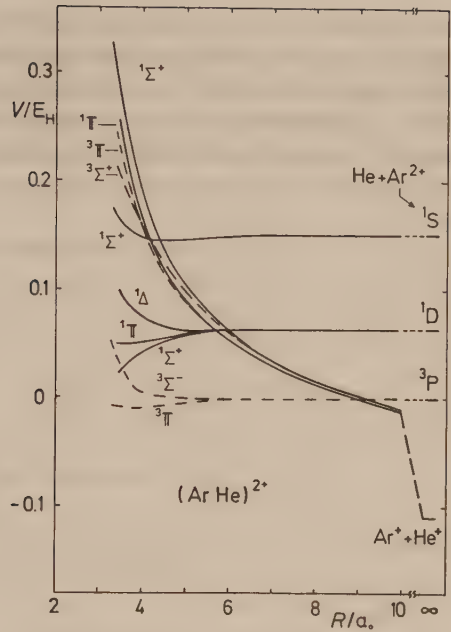
Die gestrichelten Linien sollen das Auge führen.

sind (also doppelt differentielle Wirkungsquerschnitte $d^2\sigma/d\theta dE$). Bei den gemessenen Wirkungsquerschnitten sind Oszillationen mit Perioden von $0.1^\circ - 0.2^\circ$ sichtbar. Hierbei handelt es sich um Stueckelberg-Oszillationen. Die Maxima der differentiellen Wirkungsquerschnitte liegen bei relativ kleinen Streuwinkeln, sind aber deutlich gegenüber null Grad verschoben.

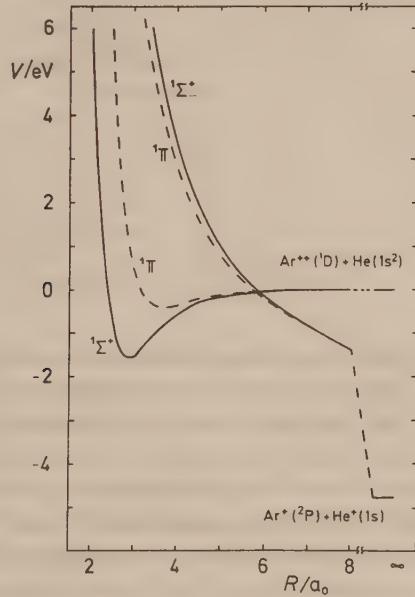
Zur Berechnung der semiklassischen Wirkungsquerschnitte müssen die Potentialkurven der im Stoß gebildeten $\text{Ar}^{2+}/\text{He}^-$ und Ar^+/He^+ -Molekülzustände bekannt sein. Quantenchemische SCF- und CI-Rechnungen (self consistent field; configuration interaction) dieser Potentiale wurden von V. Staemmler durchgeführt; die Ergebnisse sind in Figur 4.3 dargestellt. Einzelheiten der Rechnungen werden in der Veröffentlichung diskutiert (Koslowski et al. 1988). Nicht alle der gezeigten molekularen Zustände spielen für den Umladungsprozeß eine Rolle. Im Bereich kleiner Stoßgeschwindigkeiten kann die Radialkopplung zwischen den Zuständen als der zur Umladung führende Mechanismus angesehen werden. Die entsprechenden Auswahlregeln für Übergänge zwischen den Zuständen verlangen, daß der Spin des Gesamtsystems, die Symmetrie des Zustands sowie die Projektion des Bahndrehimpulses auf die Kernverbindungsachse Λ nicht geändert werden (Hird und Ali 1981). Das $\text{Ar}^{2+}(^1\text{D})/\text{He}$ -Molekül im einlaufenden Kanal hat einen Gesamtbahndrehimpuls $L = 2$ und bildet daher Σ^- , Π^- und Δ^- -Zustände. Das Molekül $\text{Ar}^+(^2\text{P})/\text{He}^+(1s)$ im auslaufenden Kanal besitzt $L = 1$ und kann daher nur zu Σ^- und Π^- -Zuständen koppeln. Aufgrund der Auswahlregeln sind daher nur die Übergänge zwischen den Zuständen $^1\Sigma^- \rightarrow ^1\Sigma^-$ und $^1\Pi^- \rightarrow ^1\Pi^-$ möglich. In Figur 4.4 sind die zu diesen Übergängen gehörenden Potentialkurven noch einmal detailliert dargestellt. Für das $\text{Ar}^{2+}(^3\text{P})/\text{He}(1s^2)$ -Molekül zeigen entsprechende Betrachtungen, daß lediglich Übergänge zwischen $^3\Pi^-$ -Zuständen zur Umladung beitragen.

Mit den Potentialkurven lassen sich die in Figur 4.5 gezeigten klassischen Ablenkfunktionen für die einzelnen Zustände berechnen. Die Ablenkfunktionen besitzen zwei Äste. Der linke Ast (bei kleinen Streuwinkeln) entspricht dem Einfang des Elektrons beim zweiten Erreichen des Kreuzungspunktes, d.h. auf dem Weg aus dem

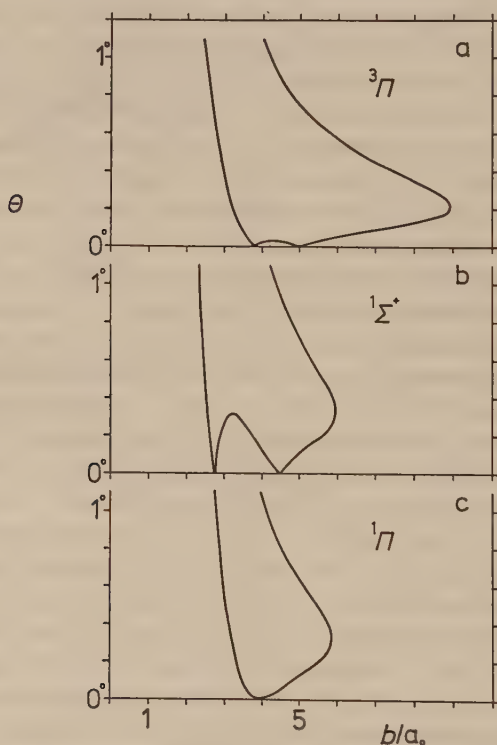
Figur 4.3 Quantenchemische SCF- und CI-Rechnungen der $(\text{ArHe})^{2+}$ -Molekülzustände (Rechnungen von V. Steamlie, s. Koslowski et al. 1988).



Figur 4.4 Potentialkurven für das $\text{Ar}^{2+} ({}^1D)/\text{He}$ -Molekül mit $\Lambda \leq 1$. (aus Figur 4.3). Die Kurvenkreuzungen liegen bei $5.8 a_0$. Der ${}^1\Sigma^+$ -Zustand hat ein Minimum von 1.6 eV, welches zu starker Attraktion zwischen den Stoßpartnern im einlaufenden Kanal führt.



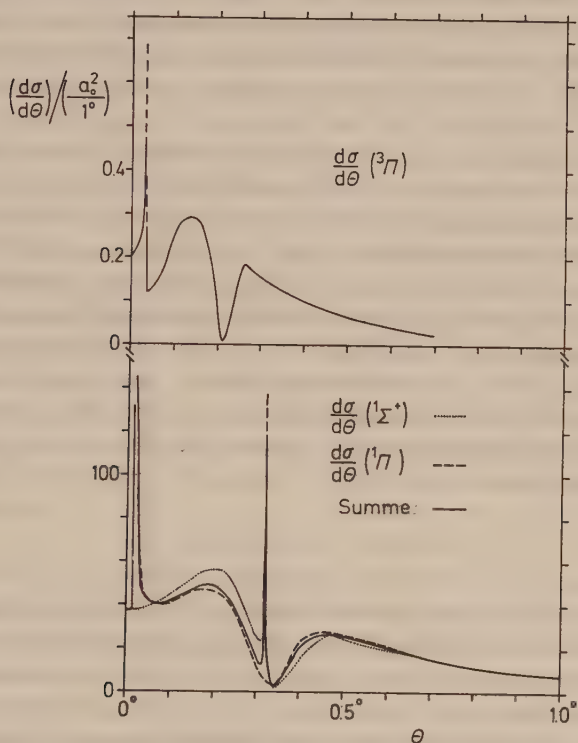
Stoß heraus. Hier macht sich die Anziehung durch die attraktiven Teile des Wechselwirkungspotentials derart bemerkbar, daß ein bestimmter Bereich von Stoßparametern bei der Streuung an den $^1\Sigma^+$ - und $^3\Pi$ -Potentialen zu negativen Streuwinkeln führt. Diese Winkel lassen sich von betragsmäßig gleichen positiven Streuwinkeln aufgrund der Rotationssymmetrie um die Strahlachse nicht



Figur 4.5 Berechnung der klassischen Ablenkfunktionen für Ar^{2+}/He -Stöße bei inelastischer Streuung an den a) $^3\Pi$ -; b) $^1\Sigma^+$ -; c) $^1\Pi$ -Potentialen.

trennen. Die Ablenkfunktion wird in diesem Bereich an der Stoßparameterachse umgeklappt (Figur 4.5a und 4.5b). Die rechten (oberen) Zweige der Ablenkfunktionen entstehen bei der Umladung im einlaufenden Kanal (beim ersten Erreichen des Kreuzungs-

punktes). Da hier sofort die starke Coulomb-Abstoßung wirkt sind die Streuwinkel bei gleichem Stoßparameter größer als im ersten Fall. Beide Äste gehen im Bereich der Kurvenkreuzung mit senkrechter Tangente ineinander über. Zu jedem Streuwinkel gibt es zwei (im Bereich wo auch noch negative Winkel auftreten sogar vier) Stoßparameter.



Figur 4.6 Klassische differentielle Wirkungsquerschnitte für den Elektroneneinfang in Ar^{2+}/He -Stößen. Der obere Teil ist der WQ für Ar^{2+} im elektronischen Grundzustand 3P , der untere Teil ist für Projektile im ersten metastabilen 1D -Zustand berechnet. Hierbei ist zwischen der Streuung am $^1\Pi$ -Potential (---) und am $^1\Sigma^+$ -Potential (.....) unterschieden. Die durchgezogene Kurve ist die gewichtete Summe beider Prozesse.

Die klassischen differentiellen Wirkungsquerschnitte lassen sich gemäß Gleichung 2.70 durch Invertierung und Differentiation der Ablenkfunktion berechnen. Die Ergebnisse für die durch die Gleichungen 4.1a und 4.1b beschriebenen Reaktionskanäle sind in Figur 4.6 dargestellt. Der obere Teil zeigt den Wirkungsquerschnitt für Elektroneneinfang durch $\text{Ar}^{2+}({}^3\text{P})$ -Grundzustandsionen, der untere Teil den für $\text{Ar}^{2+}({}^1\text{D})$ -Ionen im ersten metastabilen Zustand. Die drei hier dargestellten Kurven haben folgende Bedeutung: Die gepunktete Linie berechnet sich für den Fall, daß im Stoß der molekulare ${}^1\Sigma^+$ -Zustand gebildet wird. Die gestrichelte Kurve gilt für den ${}^1\Pi$ -Zustand. Experimentell läßt sich nicht entscheiden, welcher dieser Zustände im Stoß gebildet wurde, die Wirkungsquerschnitte müssen daher (bei klassischer Betrachtungsweise) addiert werden. Hierbei ist zu beachten, daß der ${}^1\Pi$ -Zustand zweifach entartet ist. Die Projektion des gesamten Bahndrehimpulses auf die Kernverbindungsachse kann die Werte $\Lambda = +1$ und $\Lambda = -1$ annehmen (Herzberg 1950). Das statistische Gewicht dieses Zustands ist daher doppelt so groß wie das des ${}^1\Sigma^+$ -Zustands. Bei der Addition müssen beide Wirkungsquerschnitte daher im Verhältnis 1 zu 2 gewichtet werden, zusätzlich muß der Teilchenfluß konstant gehalten werden, so daß sich folgende Gleichung ergibt:

$$d\sigma/d\theta({}^1\text{D}) = 1/3 d\sigma/d\theta({}^1\Sigma^+) + 2/3 d\sigma/d\theta({}^1\Pi); \quad (4.3)$$

Bei der rein klassischen Beschreibung ist die Einfangwahrscheinlichkeit gleich eins gesetzt, die Wirkungsquerschnitte werden i.a. zu groß bestimmt. Die absolute Größe der Wirkungsquerschnitte in Figur 4.6 wurde daher mit der Landau-Zener Wahrscheinlichkeit korrigiert. Die Kopplungselemente H_{12} sind mit der semiempirischen Formel von Olson und Salop (1976) bestimmt.

Die Wirkungsquerschnitte zeigen das für klassische Rechnungen typische Regenbogenmaximum an der Stelle, wo die Ableitung der Ablenkfunktion null wird (bei 0.35° , 0.02° und 0.33° , s. Figur 4.5). Die Minima im Wirkungsquerschnitt bei dem Winkel, wo beide Zweige der Ablenkfunktion ineinander übergehen, sind ebenfalls für die klassische Rechnung charakteristisch.

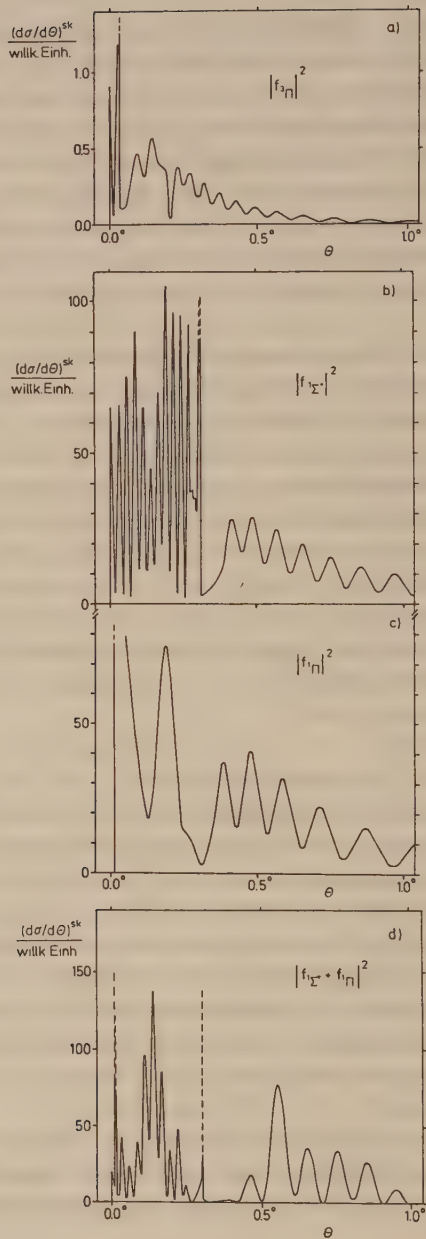
Der Wirkungsquerschnitt zu einem bestimmten Streuwinkel resultiert normalerweise aus zwei Beiträgen von unterschiedlichen Stoßparametern. Im Rahmen einer semiklassischen Betrachtung muß die Phasendifferenz zwischen den Streuamplituden beachtet werden. Im Gegensatz zum klassischen Fall, wo die Wirkungsquerschnitte (= Quadrate von Streuamplituden) addiert werden, müssen bei semiklassischer Rechnung die Streuamplituden kohärent addiert werden. Aufgrund der Phasendifferenz ergibt sich ein zusätzlicher Interferenzterm (siehe Kapitel II.4.2.).

Zur Berechnung der semiklassischen Wirkungsquerschnitte wird die Methode von Danared und Barany (1986) benutzt. Zur Bestimmung der Phasendifferenz wird die Fläche unter der Ablenkfunktion ausgewertet (Nikitin und Umanskii 1985). Ein konstanter Anteil bei der Phasendifferenz ist willkürlich zu null gesetzt. Figur 4.7 zeigt die Ergebnisse der Rechnungen. Im Teil (a) ist der semiklassische Wirkungsquerschnitt für den $^3\Pi$ -Zustand dargestellt. Deutlich sichtbar sind die Interferenzeffekte, die sogenannten Stueckelberg-Oszillationen (Stueckelberg 1932). Die Regenbogenstruktur ist weiterhin vorhanden und verschwindet erst bei streng quantenmechanischer Behandlung des Stoßprozesses (Danared und Barany 1986).

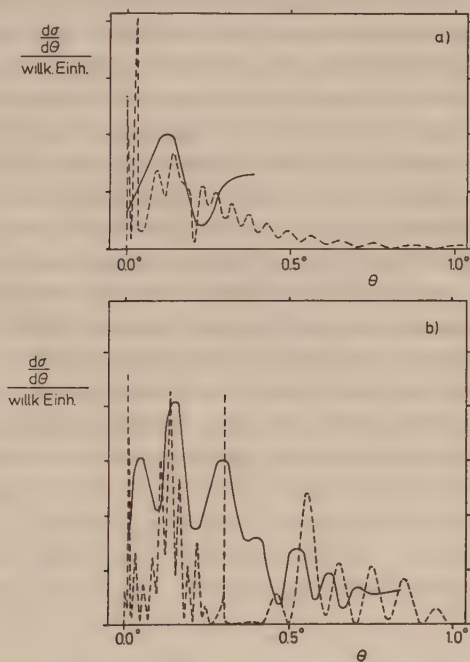
Die Wirkungsquerschnitte für die inelastische Streuung an den $^1\Sigma^-$ - und $^1\Pi$ -Potentialen sind in den Teilbildern (b) und (c) dargestellt. Neben den Stueckelberg-Oszillationen und der Regenbogensingularität sind sogenannte schnelle Oszillationen (im Bereich von Winkeln kleiner als der Regenbogenwinkel) vorhanden. Diese Oszillationen resultieren aus der Interferenz von vier Streuamplituden, da der Teil der Ablenkfunktion mit negativen Streuwinkeln umgeklappt ist. Die Periode dieser Oszillationen ist kleiner als 0.03° während die Perioden der Stueckelberg-Oszillationen größer als 0.1° sind.

Im letzten Teil des Bildes (d) ist der Wirkungsquerschnitt für die Umladung von Ar^{2+} -Ionen im ersten metastabilen Zustand 1D gezeigt. In Analogie zum klassischen Fall müssen die in (b) und

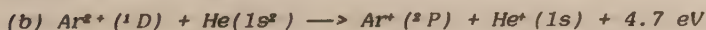
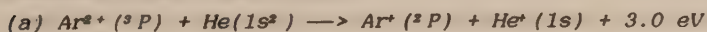
Figur 4.7 a) Semiklassischer differentieller Wirkungsquerschnitt für Reaktion 4.1a.
b) Ebenso für Reaktion 4.1b bei Streuung am $^1\Sigma^+$ -Potential.
c) wie b) für Streuung am $^1\Pi$ -Potential.
d) Kohärente Summe der Streuamplituden beider Singulett-Zustände.



(c) gezeigten Wirkungsquerschnitte addiert werden, da beide Übergänge vom gleichen Anfangszustand in den gleichen Endzustand der separierten Teilchen erfolgen. Da nicht bestimmbar ist, an welchem Potential gestreut wurde, muß die Addition kohärent durchgeführt werden, indem wiederum die Streuamplituden beider Prozesse addiert werden. Die Aufspaltung des Teilchenflusses auf beide Kanäle entspricht den statistischen Gewichten der molekularen Zustände und führt zu folgender Gleichung für den resultierenden Wirkungsquerschnitt:



Figur 4.8 Vergleich zwischen den experimentellen Daten und der semiklassischen Theorie für die untersuchten differentiellen Wirkungsquerschnitte beim Elektroneneinfang von Ar^{2+} in He. Die gestrichelten Kurven sind die Rechnungen (Figur 4.7), die durchgezogenen Kurven sind gemittelt über die Meßwerte (vgl. Figur 4.2).



$$d\sigma/d\theta(^1D) = |[(d\sigma/d\theta)^{SK}(^1\Sigma^*)]^{1/2} + [(d\sigma/d\theta)^{SK}(^1\Pi)]^{1/2}|^2. \quad (4.4)$$

(Die semiklassischen Wirkungsquerschnitte bestimmen sich aus Gleichung 2.69) Bei kleinen Streuwinkeln sind schnelle Oszillationen erkennbar, welche von langsamen Stueckelberg-Oszillationen moduliert werden.

In Figur 4.8 werden die experimentellen Ergebnisse mit den semiklassischen Rechnungen verglichen. Im Fall von $Ar^{2+}(^3P)$ -Projektilionen ist die Übereinstimmung zufriedenstellend, obwohl die Statistik der Meßdaten aufgrund des sehr kleinen Wirkungsquerschnitts dieser Reaktion noch relativ große Fehler aufweist. Für die zweite Reaktion zeigt der gemessene Wirkungsquerschnitt nicht so viele Details wie die semiklassische Theorie vorhersagt. Der Verlauf zeigt eine gute Übereinstimmung, was die Position des Maximums und den Abfall zu größeren Streuwinkeln hin betrifft. Die schnellen Oszillationen, welche bei kleinen Streuwinkeln vorhanden sein sollten, sind von der aktuellen Messung nicht aufgelöst. Dies würde eine Winkelauflösung besser als 0.01° erfordern, was zur Zeit nicht erreicht werden kann. Die Position der Maxima bei Streuwinkeln über 0.5° sind leicht verschoben im Vergleich zur Theorie. Das hängt von einem zusätzlichen Term in der Phasenverschiebung ab, welcher jedoch in den einfachen semiklassischen Rechnungen nicht enthalten ist.

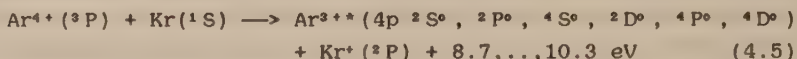
IV.2 Zwei-Elektroneneinfang

Die Untersuchung des Einfangs von zwei Elektronen in Ar^{4+}/Ar - und Ar^{4+}/Kr -Stößen sollte die Frage klären, ob dieser Prozeß als simultaner Einfang an einem Kreuzungspunkt zu beschreiben ist, oder ob es sich um einen Stufenprozeß handelt, bei dem beide Elektronen durch sukzessiven Ein-Elektroneneinfang übertragen werden. Diese Frage läßt sich durch Messung des winkeldifferentiellen Wirkungsquerschnitts und den Vergleich mit Modellrechnungen klären, da beide Einfangmechanismen zwar zum gleichen Endzustand, aber aufgrund der unterschiedlichen durchlaufenen Potentialkurven zu verschiedenen Ablenkfunktionen führen.

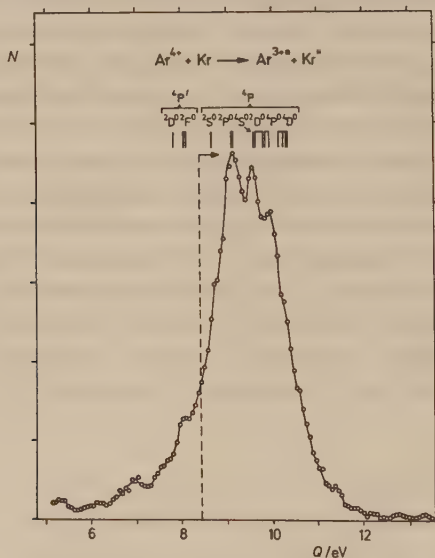
Der Zwei-Elektroneneinfang in diesen Systemen besitzt relativ kleine Wirkungsquerschnitte ($\approx 10^{-16} \text{ cm}^2$). Die mit der Apparatur erreichbaren Zählraten primärer Ar^{4+} -Ionen liegen im Bereich von $10^3/\text{s}$ bis $10^4/\text{s}$. Dementsprechend ist die Intensität sekundärer Ionen sehr klein. Die Messungen in diesen Stoßsystemen wurden daher mit dem Gegenfeldanalysator durchgeführt, was zu einer Erhöhung der Zählrate umgeladener Ionen um einen Faktor 10 – 100 führte. Bei der Gegenfeldmessung geht die Information über den Energiedefekt der Reaktion verloren, die Messung summiert über alle Ausgangskanäle. Sofern der Elektroneneinfang sehr selektiv in ein bestimmtes Niveau erfolgt, bzw. in mehrere energetisch dicht benachbarte Niveaus, läßt sich diese Methode jedoch anwenden. Um dies zu prüfen, muß das Translationsenergiespektrum durch eine separate Messung bestimmt werden. Hieraus lassen sich zusätzlich die für die Rechnungen wichtigen Potentialkurven ermitteln.

IV.2.1. Simultaner Einfang und Stufenprozeß in Ar^{4+}/Kr -Stößen

Die Messung des Translationsspektrums des Ein-Elektroneneinfangs in Ar^{4+}/Kr -Stößen (Figur 4.9) gibt über die Lage der beteiligten Potentialkurven und ihre relative Kopplungsstärke mit dem einlaufenden Kanal Auskunft. Die senkrechten Striche im oberen Teil von Figur 4.9 markieren die Lage der möglichen Reaktionskanäle. Der Einfangprozeß läßt sich durch die Gleichung



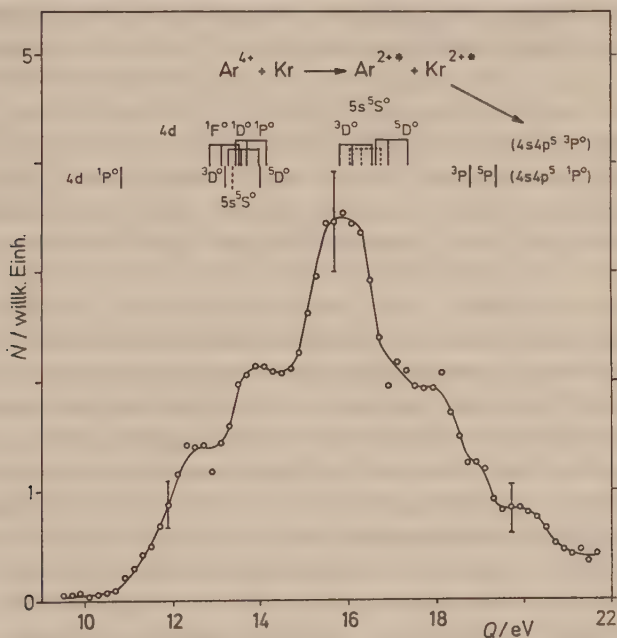
beschreiben. Der aus dem klassischen Modell berechnete minimale Energiedefekt von 8.4 eV ist durch eine senkrechte Linie markiert. Die gemessenen Reaktionskanäle lassen sich also durch



Figur 4.9 Translationsenergiespektrum der in Ar^{4+}/Kr -Stößen gebildeten Ar^{3+} -Ionen. Der Einfang erfolgt in die 4p -Zustände. Die senkrechte Linie gibt den aus dem klassischen Modell bestimmten minimalen Energiegewinn an, der Einfang erfolgt über klassisch erlaubte Bahnen.

den Einfang über klassisch erlaubte Bahnen erklären. Die Kanäle liegen sehr dicht beieinander, so daß sich aufgrund der begrenzten Auflösung einzelne Kanäle nicht trennen lassen. Der Einfang erfolgt vorwiegend in das 4p-Niveau. Die Kurvenkreuzungen der zu diesen Zuständen gehörenden Potentialkurven mit der einlaufenden Kurve liegen bei Kernabständen von 7.9 bis 9.4 a_0 .

Das Energiespektrum der durch Zwei-Elektroneneinfang gebildeten Ar^{2+} -Ionen ist in Figur 4.10 dargestellt. Es zeigt eine Verteilung mit einem Maximum bei 16 eV. Beim Einfang von zwei Elektronen gewinnt das System die dritte und vierte Ionisierungsenergie des Argons, zusammen sind das 100.55 eV. Für die doppelte Ionisierung des Kryptonatoms müssen insgesamt 38.36 eV



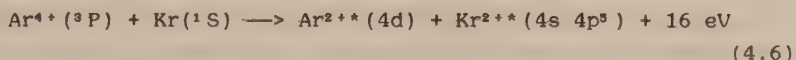
Figur 4.10 Zwei-Elektroneneinfang in Ar^{4+}/Kr -Stößen. Die Energiegewinne der resultierenden Ar^{2+} -Ionen sind hier dargestellt. Das Maximum liegt bei 16 eV und läßt sich durch die Anregung des Targets bei Einfang eines 4s- und 4p-Elektrons erklären.

aufgewendet werden, so daß die Energietönung der Reaktion 62.19 eV beträgt, falls beide Elektronen in den Grundzustand des Projektils eingefangen werden (Die Ionisierungsenergien sind der Tabelle von Moore (1970) entnommen.). Diese Energie wird jedoch nur zum Teil in Bewegungsenergie des Projektils umgewandelt, der restliche Teil wird in der Anregung von Projektil und/oder Target gespeichert. Aus dem gemessenen Energiedefekt von ≈ 16 eV ergibt sich ein Energiebetrag von ≈ 46 eV, der im Stoßsystem als innere Anregungsenergie verbleibt. Die ausschließliche Anregung des Projektils, wie sie meistens in Elektroneneinfang-Prozessen beobachtet wird, kann das Meßergebnis nicht erklären, da die dritte Ionisierungsenergie des Argons lediglich $I_3 = 40.74$ eV beträgt. Für eine alleinige Anregung des Projektils kommen also nur doppelt angeregte Zustände in Frage. Diese Zustände besitzen jedoch nur eine kurze Lebensdauer ($\approx 10^{-14}$ s) gegenüber dem Zerfall durch Autoionisation. Diese Zeit ist sehr kurz, verglichen mit der Flugzeit von $\approx 10^{-7}$ s zwischen dem Stoß und dem Nachweis. Die durch Autoionisation nach dem Einfang von zwei Elektronen entstandenen Ar^{3+} -Ionen werden aber aufgrund der Energieanalyse nicht detektiert (wenn, dann im Ein-Elektronen-einfangspektrum, dort findet sich aber kein Hinweis auf solche Prozesse).

Eine zweite Möglichkeit, die Oberschußenergie der Reaktion zu verteilen, stellt der Prozeß der Transferionisation dar, bei welchem ein weiteres Targetelektron freigesetzt wird. (Zum Begriff Transferionisation siehe Niehaus 1980.) Im vorliegenden Fall bedeutet dies, daß im Stoß zwei Elektronen des Kryptonatoms vom Argonion eingefangen werden und ein drittes Elektron des Targets ins Kontinuum gelangt; das Kryptonatom ist nach dem Stoß also dreifach ionisiert. Dieser Prozeß läßt sich als Zerfall eines hochangeregten $\text{Ar}^{2+}/\text{Kr}^{2+}$ -Moleküls (welches im Stoß durch den Einfang entsteht) in einen $\text{Ar}^{2+}/\text{Kr}^{3+}$ -Kontinuumszustand beschreiben. Das zusätzlich ionisierte Elektron besitzt kontinuierliche Werte der kinetischen Energie, die nur davon abhängt, bei welchem Kernabstand der Zerfall ins Kontinuum erfolgt. Für den Energiegewinn des Projektilions bedeutet das aber, daß keine deutlichen Peakstrukturen auftreten, sondern eine

relativ breite Verteilung im Energiegewinnspektrum, welche die Zerfallswahrscheinlichkeit widerspiegelt.

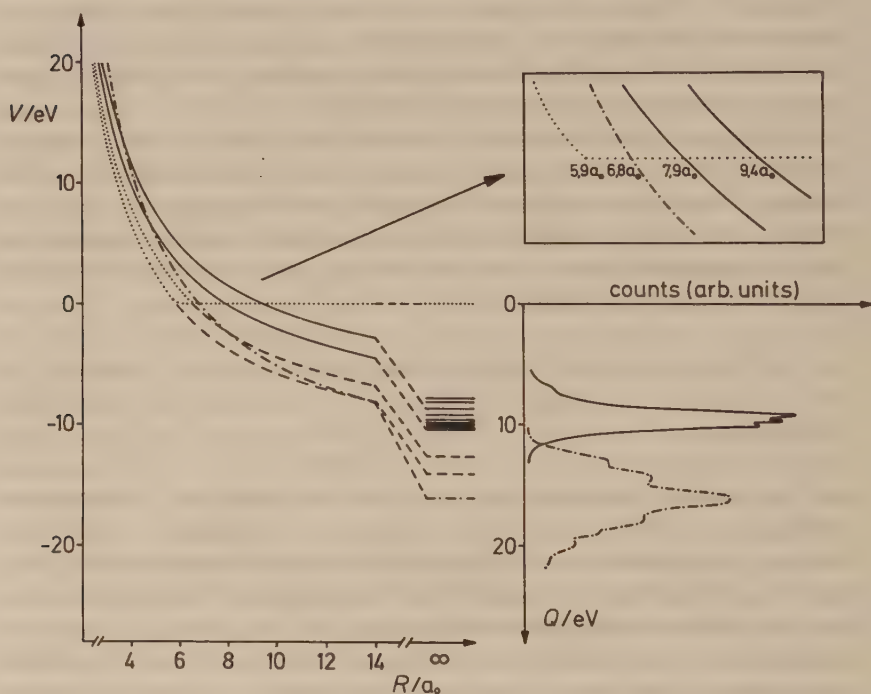
Zur Erklärung der gemessenen Peakstruktur muß also die zusätzliche Anregung des Targets herangezogen werden. Die einfachste und gleichzeitig auch die wahrscheinlichste Möglichkeit, das Target anzuregen, stellt der Einfang eines 4s- und eines 4p-Elektrons dar. Bei diesem Prozeß sind nur zwei Elektronen beteiligt, die Wahrscheinlichkeit dafür ist größer als bei einem Prozeß mit drei aktiven Elektronen, wo neben den beiden eingefangenen Elektronen noch ein drittes Elektron des Targets angeregt wird. Nach dem Stoß ist das Kr^{2+} im angeregten $4s4p^5$ Niveau, welches zu den Multipletts $^1P^\circ$ und $^3P^\circ$ koppeln kann. In Figur 4.10 sind die möglichen Reaktionskanäle durch senkrechte Striche gekennzeichnet. Das Maximum im Translationsspektrum läßt sich durch die Gleichung



beschreiben.

Aus den Reaktionskanälen des einfachen und doppelten Elektroneneinfangs ergeben sich die in Figur 4.11 gezeigten Potentialkurven. Die gepunktete Linie beschreibt das einlaufende Ar^{4+}/Kr -Molekül. Die Kurve verläuft in erster Näherung horizontal. Bei den hier betrachteten Kernabständen sollte Polarisationsanziehung auftreten, im Bild ist dagegen dargestellt, daß die Potentialkurve in eine abstoßende Coulombkurve übergeht. Dieses Verhalten wird später begründet. Die im Stoß gebildeten $\text{Ar}^{3+}/\text{Kr}^+$ -Moleküle werden durch die durchgezogenen Potentialkurven dargestellt. Die Potentiale sind in erster Näherung durch die Coulombabstoßung bestimmt. Die Differenzen der asymptotischen Werte dieser Kurven gegenüber der einlaufenden Kurve stellen die Energiegewinne der Reaktionen dar. Jedem Reaktionskanal des Ein-Elektroneneinfangsspektrums läßt sich eine Potentialkurve zuordnen. Der Übersicht halber sind nur zwei Potentiale eingezeichnet. Diese Potentiale entsprechen ungefähr den minimal und maximal auftretenden Energiedefekten. Dies sind die Einfänge in den $4p\ ^2S^\circ$ Zustand mit

einem Q -wert von 8.7 eV und in den $4p\ ^4D^\circ$ Zustand mit $Q = 10.3$ eV. Die Kurvenkreuzungen dieser Potentialkurven mit der einlaufenden Kurve liegen bei Kernabständen von $9.4\ a_0$ bzw. $7.9\ a_0$. Alle anderen auftretenden Reaktionskanäle haben ihre Kreuzung in diesem Intervall, liegen also dicht benachbart. Zur



Figur 4.11 Potentialkurven für Ein- und Zwei-Elektroneneinfang im Stoßsystem Ar^{4+}/Kr . Im rechten Teil des Bildes sind die Translationsspektren aus den Figuren 4.9 und 4.10 noch einmal dargestellt, um die Zuordnung der Potentialkurven zu einzelnen Reaktionskanälen zu verdeutlichen.

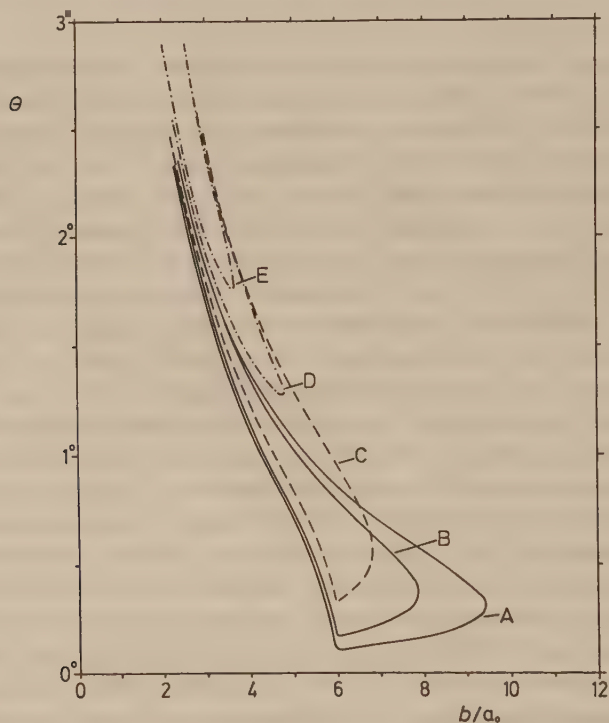
Verdeutlichung des Zusammenhangs zwischen dem Energiedefekt der Reaktion und der Lage der Potentialkurven sind im rechten Teil von Figur 4.11 die zugehörigen Translationsspektren noch einmal dargestellt. Die dem Maximum des Zwei-Elektroneneinfangs

entsprechende Potentialkurve des $\text{Ar}^{2+}/\text{Kr}^{2+}$ -Moleküls mit einem Energiedefekt von 16 eV ist strichpunktiert dargestellt. Der Kreuzungspunkt mit der horizontalen Kurve des Anfangszustands ist bei einem Kernabstand von $6.8 a_0$. Weitere Kurvenkreuzungen mit den Ein-Elektroneneinfangkurven liegen im Bereich von $3.7 a_0$ bis $4.8 a_0$.

Der Übergang der einlaufenden Kurve in eine Coulombkurve läßt sich wie folgt erklären: Entsprechend der Landau-Zener Wahrscheinlichkeit tragen Kreuzungen bei großen Kernabständen nicht effektiv zum Elektroneneinfang bei, da die Kopplung zwischen den Zuständen sehr schwach ist. Das System verhält sich diabatisch, d.h. es läuft über die Kreuzung hinweg. Bei einem mittleren Abstandsbereich liegen die zum Elektroneneinfang beitragenden Kurven (vgl. Diskussion des Reaktionsfensters in Kap. 2). Die Landau-Zener Wahrscheinlichkeit hat hier Werte von ≈ 0.5 , d.h. die Einfangwahrscheinlichkeit besitzt hier ihr Maximum. Bei noch kleineren Abständen verhält sich das System mehr und mehr adiabatisch; es treten vermiedene Kreuzungen auf. Die Wahrscheinlichkeit für einen Wechsel der Potentialkurve bei Erreichen einer Kurvenkreuzung wird nahezu 1, also wechselt das System beim Zusammenlaufen die Potentialkurve und wechselt beim Auseinanderlaufen die Potentialkurve an diesem Kreuzungspunkt erneut, befindet sich also wieder auf der ursprünglichen Kurve. Die Kopplung ist also so stark, daß diese Kreuzungen für den Einfang ineffektiv werden. Der Bereich adiabatischer Kopplung führt in den Energiegewinnspektren dazu, daß Kanäle mit großem Q -Wert (kleinem Kernabstand am Kreuzungspunkt), obwohl sie mögliche Einfangkkanäle darstellen, nicht auftreten. Beim Ein-Elektroneneinfang in Ar^{4+}/Kr -Stößen liegen weitere Kreuzungen bei $6.5 a_0$ und $5.87 a_0$, entsprechend dem Einfang in die Endzustände $4s' \ ^2D$ und $4s \ ^2P$. Beide Kanäle treten im gemessenen Spektrum nicht auf, so daß nach der obigen Diskussion die Kreuzung mit dem $4s'$ -Zustand als adiabatisch angesehen werden müßte. Dieser Zustand besitzt allerdings einen angeregten Core (nämlich 1D , während das einlaufende Ar^{4+} -Ion im 3P -Zustand vorliegt), so daß zu erwarten ist, daß die entsprechende Kurvenkreuzung noch nicht vollständig adiabatisch durchlaufen wird. Es kann deshalb erst die Kreuzung

bei $5.87 a_0$, die zum Einfang in den $4s^2 P$ -Zustand führen würde, als adiabatisch angenommen werden.

Aus den Potentialkurven lassen sich nun die klassischen Ablenkfunktionen für den Ein- und Zwei-Elektroneneinfang berechnen. In



Figur 4.12 Klassische Ablenkfunktionen für die Projektionen, welche in Ar^{4+}/Kr -Stößen ein oder zwei Elektronen eingefangen haben.

A: Ein-Elektroneneinfang bei $R_1 = 9.4 a_0$;

B: Ein-Elektroneneinfang bei $R_1 = 7.9 a_0$;

C: simultaner Zwei-Elektroneneinfang bei $R_2 = 6.8 a_0$;

D: Stufenprozeß des Zwei-Elektroneneinfangs, $R_1 = 7.9 a_0$,
 $R_{12} = 4.8 a_0$;

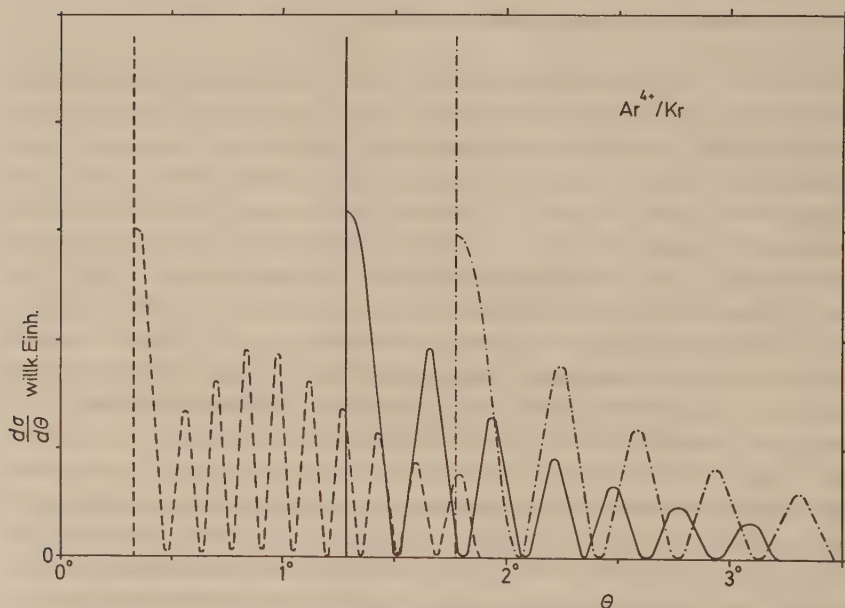
E: Stufenprozeß des Zwei-Elektroneneinfangs, $R_1 = 9.4 a_0$,
 $R_{12} = 3.7 a_0$;

Figur 4.12 sind die Ergebnisse dargestellt. Die Kurven A und B sind für den Ein-Elektroneneinfang gerechnet und entsprechen der Bewegung des Systems auf den in Figur 4.11 gezeigten Potentialkurven. Die unteren Zweige dieser Ablenkfunktionen entsprechen dem Elektroneneinfang beim zweiten Erreichen des Kreuzungspunktes. Der Verlauf der Kurven wird bei Stoßparametern kleiner als $5.9 a_0$ durch den adiabatischen Übergang von der einlaufenden Potentialkurve auf eine abstoßende Coulombkurve zu größeren Streuwinkeln hin verschoben. Das relativ scharfe Abknicken bei $b \approx 6 a_0$ wird dadurch hervorgerufen, daß bei einem Kernabstand von $R = R_k$ auf das andere Potential "umgeschaltet" wird. Der tatsächliche Verlauf wird einen gleichmäßigeres Verhalten zeigen, da der Übergang zwischen den Potentialkurven in einem breiteren Kernabstandsbereich um R_k herum erfolgt.

Die Kurve C ist für den simultanen Einfang von zwei Elektronen an der Kreuzung bei $6.8 a_0$ gerechnet. Das Minimum des Streuwinkels beträgt 0.35° und wird bei Stoßparametern um $6 a_0$ erreicht. Der sukzessive Prozeß des Zwei-Elektroneneinfangs führt zu den Ablenkfunktionen D und E, welche wiederum den in Figur 4.11 gezeigten Potentialkurven für den Einfang des ersten Elektrons entsprechen. Der minimale Streuwinkel für Kurve D ist 1.3° , für die in E gerechnete Ablenkfunktion 1.8° . Es ist deutlich erkennbar, daß die Lage der ersten Kurvenkreuzung R_k einen starken Einfluß auf den minimalen Streuwinkel hat. Dieses Verhalten ist dadurch zu erklären, daß der Einfang des ersten Elektrons (und damit der Übergang auf die abstoßende Coulombkurve) im einlaufenden Kanal stattfindet. Liegt die erste Kreuzung nun bei einem großen Kernabstand, dann wirkt die Coulombkraft über ein längeres Stück der Trajektorie, gleichzeitig liegt die zweite Kreuzung bei einem kleineren Kernabstand, so daß eine große abstoßende Kraft wirkt. Bei gleichem Stoßparameter besitzt die Ablenkfunktion mit kleinerem R_k also auch einen kleineren Ablenkwinkel.

Die Ergebnisse der Rechnungen für die semiklassischen differentiellen Wirkungsquerschnitte sind in Figur 4.13 aufgetragen, wobei die Skala willkürlich gewählt ist. In der Figur ist erkennbar, daß die verschiedenen Prozesse ihr Maximum bei deut-

lich getrennten Winkeln aufweisen. Der direkte Prozeß, bei dem der untere Zweig der Ablenkfunktion im wesentlichen durch den adiabatischen Übergang im einlaufenden Kanal bestimmt wird, tritt bei kleineren Streuwinkeln auf. Der Stufenprozeß besitzt das Maximum im differentiellen Wirkungsquerschnitt bei größeren Streuwinkeln (vgl. die Minima in den Ablenkfunktionen, Regenbogenwinkel). Die Wirkungsquerschnitte zeigen Stueckelberg-Oszillationen mit Perioden von ca 0.2° . Dies ist kleiner als die experimentelle Auflösung (s. Kapitel 3.2). Für einen Vergleich mit den experimentellen Werten wurden daher die berechneten Wirkungsquerschnitte mit der experimentellen Auflösung (näherungsweise ein Gaußprofil mit $\Gamma_{FWHM} = 0.47^\circ$) gefaltet. Die



Figur 4.13 Semiklassische differentielle Wirkungsquerschnitte für die Umladungsreaktion

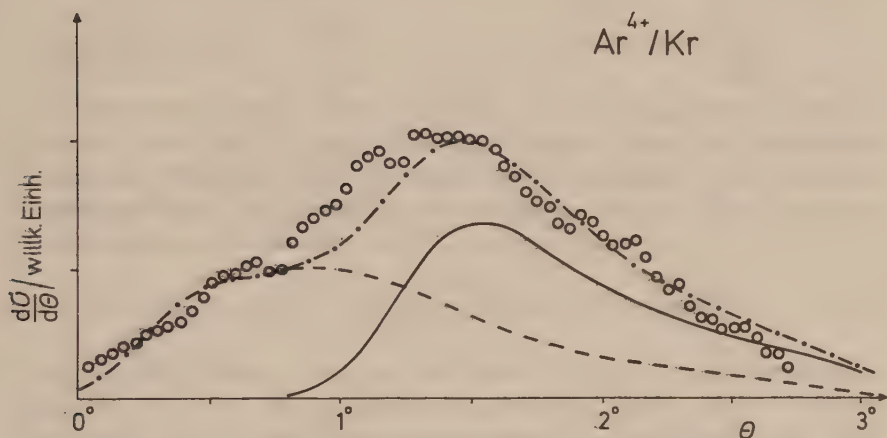


(---) direkter Prozeß bei $R_2 = 6.8 a_0$;

(- · - · -) Stufenprozeß, $R_1 = 9.4 a_0$, $R_{12} = 3.7 a_0$;

(—) Stufenprozeß, $R_1 = 7.9 a_0$, $R_{12} = 4.8 a_0$;

Ergebnisse der Faltung sind zusammen mit den auf $d\sigma/d\theta$ skalierten Meßdaten in Figur 4.14 abgebildet. Die Meßpunkte sind als offene Kreise dargestellt. Die gestrichelte Kurve ist die Faltung des Wirkungsquerschnitts für den direkten Prozeß, die durchgezogene Kurve stellt den Stufenprozeß dar. Die strichpunktiierte Kurve ist die Summe aus den Wirkungsquerschnitten beider Prozesse, wobei die Amplituden der einzelnen Wirkungsquerschnitte so gewählt sind, daß sich in der Summe die beste Übereinstimmung mit dem Experiment ergibt. Der totale Wirkungsquerschnitt für einen Prozeß ergibt sich aus der Integration über den Streuwinkel, er



Figur 4.14 Vergleich der experimentellen Daten (o) mit den gefalteten Ergebnissen der semiklassischen Rechnungen für die verschiedenen Prozesse.

(---) einstufiger Prozeß, $R_2 = 6.8 a_0$;

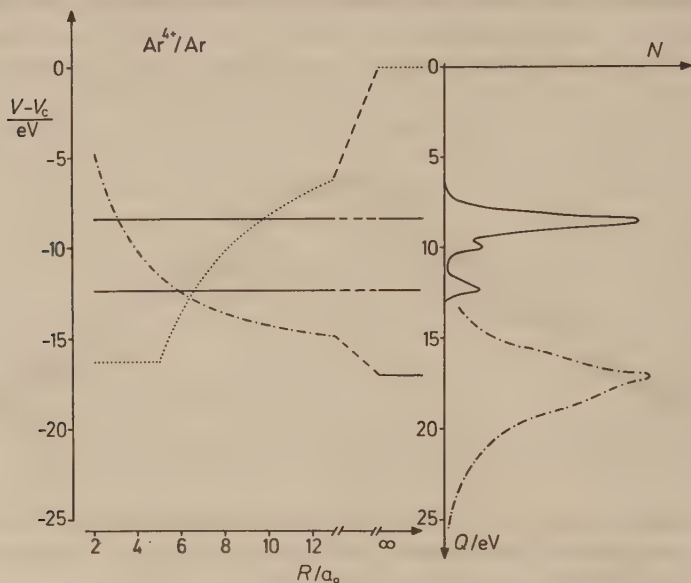
(—) Stufenprozeß, $R_1 = 7.9 a_0$, $R_{12} = 4.8 a_0$;

(-·-·-) Summe der beiden Prozesse, s. Text.

ist also proportional zur Fläche unter den Kurven. Ein Vergleich der Flächen zeigt, daß sich die Wirkungsquerschnitte für den einstufigen und den zweistufigen Prozeß wie 3 : 4 verhalten. Im untersuchten Stoßsystem sind beide Mechanismen mit ungefähr gleichen Anteilen am Prozeß des Zwei-Elektroneneinfangs beteiligt.

IV.2.2 Ar^{4+}/Ar : Zwei-Elektroneneinfang durch den Stufenprozeß

Um zu überprüfen, ob das im Stoßsystem Ar^{4+}/Kr festgestellte Ergebnis allgemeine Gültigkeit besitzt, oder nur systemspezifisch ist, wurde eine weitere Messung des differentiellen Wirkungsquerschnitts in einem anderen System durchgeführt. Für das Stoßsystem Ar^{4+}/Ar wurden die selben Messungen und Berechnungen vorgenommen, wie für das Kr-Target. Im folgenden sollen daher nur die wichtigen Ergebnisse dargestellt werden.



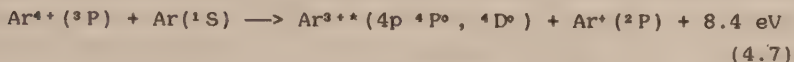
Figur 4.15 Potentialkurven für das System $(\text{ArAr})^{4+}$. Im rechten Teil des Bildes sind die Translationsenergiespektren für den Ein-Elektroneneinfang (—) und den Zwei-Elektroneneinfang (---) dargestellt (aus Puerta et al. 1985 und Koslowski 1984). (Die Darstellung der Potentiale ist relativ zum Coulombpotential $V_c = 3a/R$ des Ein-Elektroneneinfangs gewählt.)

(.....) einlaufender Kanal;

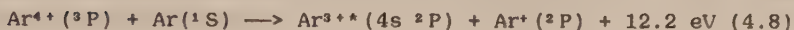
(—) Ein-Elektroneneinfang, $\Delta E = 8.4$ eV und 12.2 eV;

(---) Zwei-Elektroneneinfang, $\Delta E = 17$ eV.

Die Translationsenergiespektren für den Ein- und Zwei-Elektroneneinfang (rechter Teil von Figur 4.15) entstammen älteren Messungen und sind bei Puerta et al. (1985) und Koslowski (1984) im Detail erläutert. Die Analyse der Spektren ergibt, daß der Ein-Elektroneneinfang durch die Gleichungen

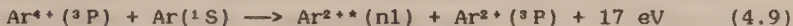


und



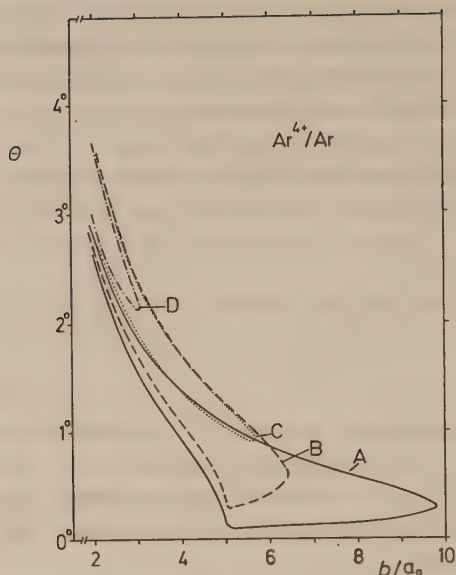
beschrieben wird.

Der Zwei-Elektroneneinfang erfolgt in hochangeregte Zustände ($n \geq 5$) des Ar^{2++} . Experimentell lassen sich die einzelnen Zustände, die sehr dicht liegen, nicht auflösen. Das Energiegewinnspektrum zeigt ein Maximum bei einem Q -Wert von 17 eV und wird durch die Gleichung



beschrieben. Der linke Teil von Figur 4.15 zeigt die Potentialkurven, die an der Umladung in diesem System hauptsächlich beteiligt sind. Die Kurvenkreuzungen für den Ein-Elektroneneinfang liegen bei Kernabständen von $6.7 a_0$ und $9.7 a_0$, die Kreuzungen des direkten Zwei-Elektroneneinfangs liegen bei Kernabständen um $6.4 a_0$. Die Umladungskanäle untereinander besitzen Kreuzungen bei $3.2 a_0$ und $5.7 a_0$.

Mit der gleichen Argumentation wie Stoßsystem Ar^{4+}/Kr liefert die Analyse des Translationsspektrums der gebildeten Ar^{3+} -Ionen für die Lage der vollständig adiabatischen Kreuzung einen Kernabstand von $5.0 a_0$. Dies entspricht dem Einfang des Elektrons in die $3\text{d } {}^2, {}^4\text{P}$ -Zustände, welche einen Energiedefekt von 16.3 eV aufweisen, aber im Translationsspektrum nicht beobachtet werden. Die Potentialkurve des Eingangskanals verläuft daher für $R < 5 a_0$ horizontal (vgl. Figur 4.15).



Figur 4.16 Klassische Ablenkfunktionen für den Ein- und Zwei-Elektroneneinfang im Stoßsystem Ar^{L+}/Ar bei $E = 800$ eV.

A: Ein-Elektroneneinfang bei $R_1 = 9.7 a_0$.

B: simultaner Zwei-Elektroneneinfang bei $R_2 = 6.4 a_0$.

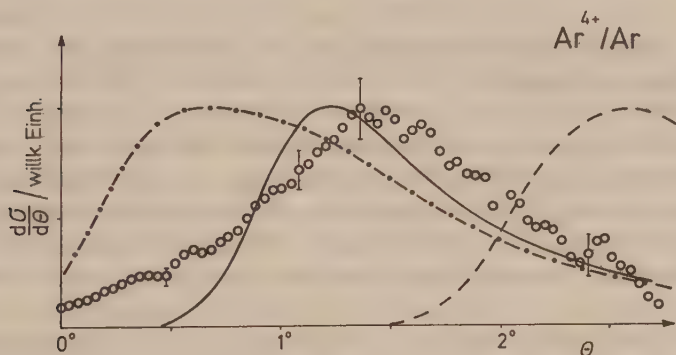
C: sukzessiver Zwei-Elektroneneinfang bei $R_1 = 6.7 a_0$ und $R_{12} = 5.7 a_0$.

D: sukzessiver Zwei-Elektroneneinfang bei $R_1 = 9.7 a_0$ und $R_{12} = 3.2 a_0$.

Die Ablenkfunktionen, welche anhand dieser Potentiale berechnet wurden, sind in Figur 4.16 gezeigt. Die Kurve B wurde für den simultanen Einfang der beiden Elektronen bei einem Kernabstand von $6.4 a_0$ berechnet. Der minimale Streuwinkel für diesen Prozeß beträgt 0.3° . Die Kurven C und D stellen die Ablenkfunktionen für den Stufenprozeß dar. Die Kurven unterscheiden sich durch die Wahl der Kurvenkreuzung, an der das erste Elektron eingefangen wird. Bei der Ablenkfunktion C wurde diese Kreuzung zu $R_1 = 6.7 a_0$ angenommen (entsprechend der Einfangreaktion nach Gleichung 4.8), die Kurve D berechnet sich unter der Annahme, daß

das erste Elektron bei $R_1 = 9.7 a_0$ eingefangen wird (Ein-Elektroneneinfang nach Gleichung 4.7). Da im zweiten Fall die Kreuzung der Umladungskanäle untereinander bei einem relativ kleinen Kernabstand von $R_{12} = 3.7 a_0$ liegt, kann dieser Prozeß nur bei kleinen Stoßparametern ($b < 3.7 a_0$) erfolgen. Der kleine Stoßparameter und die bei einem großen Kernabstand liegende erste Kreuzung führen dazu, daß im Stoß eine sehr starke abstoßende Kraft entlang eines großen Teils der Bahn wirkt. Der minimale Streuwinkel für diesen Prozeß beträgt demzufolge 2.1° und ist deutlich größer, als der minimale Streuwinkel von 0.95° des anderen Stufenprozesses.

In Figur 4.17 sind die Ergebnisse der Rechnungen für beide diskutierten Stufenprozesse sowie für den direkten Prozeß dargestellt. Um einen Vergleich mit den Meßergebnissen (Punkte) zu ermöglichen, wurden die theoretischen Wirkungsquerschnitte mit



Figur 4.17 Vergleich zwischen Experiment und semiklassischer Theorie der differentiellen Wirkungsquerschnitte für die Umladungsreaktion $\text{Ar}^{4+} + \text{Ar} \rightarrow \text{Ar}^{3+} + \text{Ar}^{2+}$.

(o) experimentelle Daten;

Die Kurven stellen die mit der apparativen Auflösung gefalteten Ergebnisse der Rechnungen dar.

(—) Stufenprozeß mit $R_1 = 6.7 a_0$, $R_{12} = 5.7 a_0$;

(---) Stufenprozeß mit $R_1 = 9.7 a_0$, $R_{12} = 3.2 a_0$;

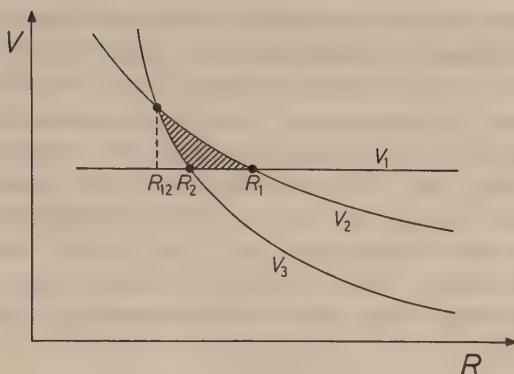
(-·-·-) direkter Prozeß mit $R_2 = 6.8 a_0$.

der Apparaturauflösung gefaltet. Die experimentellen Daten und die berechneten Kurven sind auf die gleiche Höhe normiert. Der gemessene differentielle Wirkungsquerschnitt stimmt relativ gut mit dem aus der Ablenkfunktion C berechneten Wirkungsquerschnitt überein. Im Rahmen der Meßgenauigkeit sowie der Genauigkeit der einfachen semiklassischen Rechnungen läßt sich der Zwei-Elektroneneinfang in diesem Stoßsystem durch den zweistufigen Einfang an den Kreuzungen $R_1 = 6.7 a_0$ und $R_{12} = 5.7 a_0$ (durchgezogene Linie) beschreiben. Der simultane Einfang (strichpunktierte Linie) sowie der andere Stufenprozeß (gestrichelte Linie) brauchen zur Erklärung des Meßergebnisses nicht herangezogen zu werden. Der Einfang des ersten Elektrons beim Stufenprozeß erfolgt in diesem Stoßsystem an einer relativ weit innen liegenden Kurvenkreuzung. Eine verallgemeinerte Betrachtung hierzu wird im nächsten Kapitel vorgestellt.

IV.2.3 Diskussion und Vergleich der Ergebnisse in beiden untersuchten Systemen

Die beiden untersuchten Stoßsysteme zeigen ein sehr unterschiedliches Verhalten bezüglich des Mechanismus für den Zwei-Elektroneneinfang. Während beim System Ar^{4+}/Kr beide Prozesse zu ungefähr gleichen Teilen beitragen, ist im Stoßsystem Ar^{4+}/Ar fast nur der Stufenprozeß wirksam. Zur Erklärung dieses Unterschiedes soll im folgenden die relative Anordnung der drei Potentialkurvenkreuzungen R_1 , R_2 und R_{12} (s. Figur 4.18) betrachtet werden.

Zuerst soll der Fall betrachtet werden, daß die drei Kreuzungen relativ weit voneinander entfernt sind. Die Fläche des schraffiert gezeichneten "Dreiecks" in Figur 4.19 ist groß und R_1 und R_{12} liegen bei stark unterschiedlichen Kernabständen. Im Stoß erreicht das System zuerst die Kreuzung R_1 . Ist diese Kreuzung sehr diabatisch, dann geht der meiste Fluß der einlaufenden Teilchen über diese hinweg und nur ein geringer Teil erreicht die zweite Kreuzung des Stufenprozesses R_{12} . Der Wirkungsquerschnitt



Figur 4.18 Drei-Zustandssystem zur Beschreibung des Zwei-Elektroneneinfangs. Durch die Lage der Kreuzungspunkte R_1 und R_2 ist die Größe des "Dreiecks" $R_1 - R_2 - R_{12}$ (schraffierte Fläche) bestimmt.

für den zweistufigen Prozeß ist deshalb klein. Verhält sich andererseits die Kreuzung bei R_1 teilweise adiabatisch, so ist zu erwarten, daß die Kopplung bei R_2 viel stärker ist, da R_2 bei einem wesentlich kleineren Kernabstand liegt und es sich auch hier um einen Ein-Elektronen-Übergang handelt. Die Landau-Zener Wahrscheinlichkeit p_{12} wird daher nahezu 1 und $P_{12} = 2p_{12}(1-p_{12})$ geht gegen null, so daß der zweistufige Einfangprozeß wiederum sehr unwahrscheinlich wird. Ein Beitrag zum Zwei-Elektroneneinfang ist in diesem Fall nur durch den direkten Prozeß möglich.

Ein großer Beitrag vom Stufenprozeß wird nur dann vorhanden sein, wenn die Kopplung an den Kreuzungen R_1 und R_{12} gleichzeitig mittlere Werte besitzt, d.h. aber, daß der Abstand der Kreuzungen und daher auch die Fläche des Dreiecks klein sein muß. Die Kopplungsstärken bei R_1 und R_{12} sind also vergleichbar groß. Die Kopplung bei R_2 ist aber deutlich schwächer, da ein Zwei-Elektronenprozeß vorliegt (vgl. Janev und Presnyakov 1987). Verhält sich die Kreuzung R_1 nun sehr diabatisch, dann ist es die Kreuzung R_2 ebenfalls. Der Wirkungsquerschnitt für den Zwei-Elektroneneinfang nimmt kleine Werte an, unabhängig vom Einfangmechanismus. Im Fall einer sehr adiabatischen ersten Kreuzung

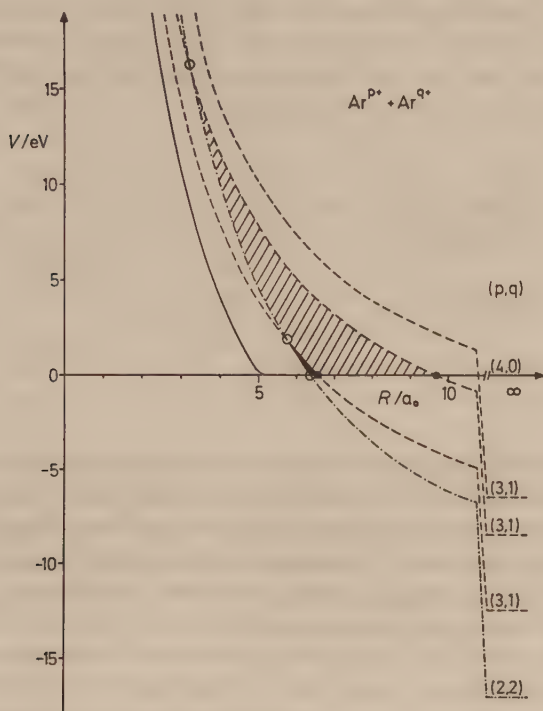
erreicht nur wenig des einlaufenden Flusses die Kreuzung R_2 , auch in diesem Fall ist der Wirkungsquerschnitt sehr klein. Nimmt die Kopplung bei R_1 und R_2 mittlere Werte an, dann tritt der Stufenprozeß stark in Erscheinung. Obwohl in diesem Fall relativ viel einlaufender Fluß die Kreuzung R_2 erreicht, kann diese nicht sehr effektiv für den Einfang werden, da die Kopplung hier wesentlich kleiner ist als bei R_1 , d.h. die Kreuzung verhält sich im wesentlichen noch stark diabatisch. Bei dicht benachbarten Kurvenkreuzungen spielt der simultane Prozeß keine Wichtige Rolle; die Beiträge zum Zwei-Elektroneneinfang kommen vom Stufenprozeß.

Nimmt der Abstand der Kreuzungen R_1 und R_2 mittlere Werte an, dann können aufgrund der obigen Diskussion beide Prozesse zum Zwei-Elektroneneinfang beitragen. Um beide Prozesse zu ermöglichen, muß die Kopplung an der Kreuzung R_1 mittlere Werte besitzen, damit ein Teil des einlaufenden Flusses die Kreuzung R_2 erreicht, der andere Teil gelangt zur Kreuzung R_2 und kann dort über den direkten Prozeß umladen.

Im untersuchten Stoßsystem Ar^{4+}/Kr besitzt der Abstand der Kreuzungen mittlere Werte ($R_1 = 7.9 a_0$, $R_2 = 6.8 a_0$). Die Analyse der experimentellen Ergebnisse zeigt Beiträge von beiden Prozessen, in Obereinstimmung mit der obigen Diskussion.

Im zweiten Fall (Ar^{4+}/Ar) liegen die Kreuzungen R_1 , R_2 und R_3 des für die Umladung effektiven Stufenprozesses sehr dicht beieinander (bei Kernabständen von $6.7 a_0$, $6.4 a_0$ und $5.7 a_0$). Die Fläche des Dreiecks ist sehr klein. Die zweite für den Stufenprozeß diskutierte Möglichkeit weist große Abstände der Kreuzungspunkte auf ($R_1 = 9.7 a_0$, $R_2 = 6.4 a_0$ und $R_3 = 3.2 a_0$); das durch die Kreuzungspunkte gebildete Dreieck besitzt eine große Fläche. Figur 4.19 zeigt die Potentialkurven für dieses System. Die Dreiecke der beiden Stufenprozesse sind gekennzeichnet. Die obige Diskussion hat gezeigt, daß bei einem sehr großen Dreieck der Stufenprozeß unwahrscheinlich ist. Beiträge des durch das große Dreieck beschriebenen Stufenprozesses werden zur Erklärung der experimentellen Ergebnisse auch nicht benötigt. Bei

einem sehr kleinen Dreieck überwiegen die Beiträge vom Stufenprozeß die des direkten Prozesses. Dies wird durch die experimentellen Ergebnisse ebenfalls bestätigt.



Figur 4.19 Potentialkurven für den Zwei-Elektroneneinfang im Stoßsystem Ar^{p+}/Ar . Die Kreuzungspunkte der in diesem System möglichen Stufenprozesse bilden entweder ein sehr kleines Dreieck (schwarz) oder ein sehr großes Dreieck (schraffiert). Die dargestellten Potentialkurven entsprechen jenen aus Figur 4.15.

Diese qualitativen Überlegungen lassen sich im Rahmen eines Drei-Zustands-Modells (wie es in Figur 4.18 dargestellt ist) auch quantitativ durchführen. Figur 4.20 zeigt Wirkungsquerschnitte, die mit dem Landau-Zener Formalismus berechnet wurden. Die

Wirkungsquerschnitte für den Zwei-Elektroneneinfang über den Stufenprozeß (gestrichelte Kurven) und den direkten Prozeß (durchgezogene Kurven) sind in Abhängigkeit der Lage der Kreuzungspunkte R_1 und R_2 dargestellt. Die Gesamtwahrscheinlichkeiten für den einstufigen Einfang $P^{(1)}$ und den zweistufigen Prozeß $P^{(2)}$ lassen sich durch die Landau-Zener Wahrscheinlichkeiten p_1 , p_2 und p_{12} für das Verbleiben auf der ursprünglichen Potentialkurve an den Kreuzungspunkten R_1 , R_2 und R_{12} durch die Gleichungen

$$\begin{aligned} P^{(1)} &= p_1 p_2 (1-p_2) (1+p_{12}^2 + (1-p_{12})^2) & b < R_{12} \\ P^{(1)} &= p_1 p_2 (1-p_2) & b > R_{12} \end{aligned} \quad (4.10)$$

und

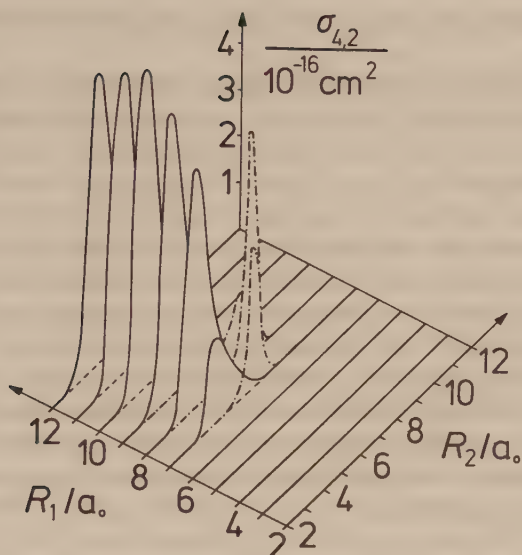
$$\begin{aligned} P^{(2)} &= 2 (1-p_1) p_{12} (1-p_{12}) p_2 & b < R_{12} \\ P^{(2)} &= 0 & b > R_{12} \end{aligned} \quad (4.11)$$

ausdrücken. Die Kopplungselemente H_{12} und H_{13} zur Berechnung der Wahrscheinlichkeiten p_1 und p_{12} sind mit der semiempirischen Formel von Olson und Salop bestimmt, das Kopplungselement H_{13} wurde mit der von Barat angegebenen Beziehung (Gleichung 2.60) berechnet. Die Wirkungsquerschnitte $\sigma^{(1)}$ für die beiden Einfangmechanismen berechnen sich dann zu

$$\sigma^{(1)} = 2\pi \int_0^{b_{\max}} P^{(1)} b \, db \quad (4.12)$$

wobei der maximale Stoßparameter $b_{\max}$ für den einstufigen Einfang gleich R_2 ist; zum Stufenprozeß können nur Stoßparameter kleiner R_{12} führen. Die Rechnungen wurden für typische Parameter der von uns untersuchten Systeme durchgeführt ($q = 4$, $E = 800$ eV).

Die in Figur 4.20 gezeigten Resultate der Rechnungen sind in Obereinstimmung mit der obigen Diskussion. Der Stufenprozeß besitzt für kleine Dreiecke ($R_1 \approx R_2 \approx R_{12}$) einen großen Wirkungsquerschnitt, falls die Kopplung mittlere Werte besitzt. In diesem Beispiel tragen nur Werte von $R_1 \approx R_2 \approx 7..9 a_0$ zum Stufenprozeß bei. Bei einem großen Abstand der Kreuzungen



Figur 4.20 Wirkungsquerschnitte für den Zwei-Elektroneneinfang als Funktion der Kernabstände der Kreuzungen R_1 und R_2 . Die Wirkungsquerschnitte wurden mit dem Drei-Zustandsmodell aus Figur 4.19 berechnet. Die Kopplungen H_{12} und H_{23} wurden mit der semiempirischen Formel von Olson und Salop bestimmt; das Kopplungselement H_{13} wurde nach der von Barat angegebenen Beziehung berechnet. Die Rechnungen wurden für typische Parameter der von uns untersuchten Systeme durchgeführt ($q = 4$, $E = 800$ eV).
(—) simultaner Einfang; (---) Stufenprozeß.

dominiert der simultane Einfang. Wenn R_1 große Werte besitzt, d.h. die Kreuzung verhält sich sehr diabatisch, erreicht viel Fluß die Kreuzung R_2 und falls dort die Kopplung nicht zu schwach ist, können Übergänge auftreten.

Beim Stoßsystem Ar^{4+}/Kr ist $R_1 = 7.9 a_0$ und $R_2 = 6.8 a_0$. Die Ergebnisse der Rechnung zeigen für diese Werte Beiträge von beiden Mechanismen. Beim System Ar^{4+}/Ar ist $R_1 = 6.7 a_0$ und $R_2 = 6.4 a_0$; die Rechnung ergibt, daß hier dominant der Stufen-

prozeß auftritt.

Die relativ einfache Beschreibung mit einem Drei-Zustandssystem und dem Landau-Zener Mechanismus ergibt sowohl qualitativ als auch quantitativ eine gute Übereinstimmung mit den experimentellen Resultaten.

Im allgemeinen Fall des Zwei-Elektroneneinfangs durch ein hoch geladenes Ion gibt es im gesamten Kernabstandsbereich viele Kreuzungen, sowohl mit den Ein-Elektroneneinfangkanälen als auch mit den Potentialkurven des Zwei-Elektroneneinfangs. Durch die weiter außen liegenden Kreuzungen geht einlaufender Fluß verloren und nur ein kleiner Teil erreicht die zum direkten Prozeß beitragenden Kreuzungen, die weiter innen liegen. Der Zwei-Elektroneneinfang sollte daher in der Regel durch den Stufenprozeß dominiert werden.

V. ZWEI-ELEKTRONEN-PROZESSE BEIM EIN-ELEKTRONENEINFANG

V.1. Ein-Elektroneneinfang in Ar^{3+}/Ar -Stößen: Test der erweiterten MCLZ-Rechnungen

Der Ein-Elektroneneinfang in Stößen von Ar^{3+} -Ionen mit Ar-Atomen erfolgt in eine große Anzahl angeregter Zustände des Ar^{2+} und führt daher zu einer breiten Verteilung von Energiegewinnen der gebildeten Ar^{2+} -Ionen. Figur 5.1 zeigt das Translationsenergiespektrum. Die gemessenen Energiegewinne liegen im Bereich von 4.7 eV bis 11.7 eV. Das Maximum liegt bei einem Energiegewinn von ca 7 eV und ist in Übereinstimmung mit der Vorhersage des einfachen klassischen Modells. Im oberen Teil des Bildes sind die möglichen Reaktionskanäle durch senkrechte Striche gekennzeichnet. Die Termbezeichnungen geben die angeregten Zustände im Ar^{2+} -Ion an. Rechts im Bild sind die Zustände der primären Ar^{3+} -Ionen aufgeführt, der Grundzustand $4S^0$ und die metastabilen Zustände $2D^0$ und $2P^0$. Zu jedem dieser Zustände gibt es unterschiedliche Reaktionskanäle, welche in der entsprechenden Reihe dargestellt sind. Eine Analyse des Spektrums findet sich bei Huber et al. (1984); eine weitergehende Untersuchung, bei welcher der Einfluß der metastabilen Projektionen auf die Umladung diskutiert wird, wurde von Binder et al. (1987) durchgeführt. Die in Tabelle 5.1 aufgelisteten Reaktionskanäle tragen hauptsächlich zur Umladung bei. In der Tabelle werden der Zustand des Projektilions vor dem Stoß, der Zustand des gebildeten Ar^{2+} -Ions sowie der Energie-defekt der Reaktion angegeben. Bei den mit einem Stern gekennzeichneten Reaktionskanälen wird ein 3s Elektron des Targets eingefangen, so daß dieses nach dem Stoß im angeregten $3s3p^6\ 2S$ Zustand vorliegt. Aufgrund der Vielzahl der auftretenden Reaktionskanäle (mehr als 20), sowie der Besonderheiten einiger Kanäle, stellt diese Umladungsreaktion einen guten Test für die unterschiedlichen Modellbeschreibungen, insbesondere für die MCLZ-Rechnungen dar. Ein Vergleich mit den Reaktionsfenstern nach Niehaus, Kimura und Taulbjerg, sowie mit unseren erweiterten MCLZ-Rechnungen, welche den empirischen diabatischen Faktor berücksichtigen, ist in Figur 5.2 gezeigt. Hier sind die zustandsselektiven Wirkungsquerschnitte der einzelnen Umladungs-

kanäle (offene Balken) auf einer absoluten Skala aufgetragen.

Die Bestimmung der zustandsselektiven Wirkungsquerschnitte wird im Folgenden erläutert. Der Anteil des Zustands i im Primärstrahl wird mit f_i bezeichnet. Der zustandsselektive Wirkungsquerschnitt für den Einfang eines Elektrons in den Zustand j , wobei das Projektilion vorher im Zustand i war, ist mit σ_{ij} bezeichnet. Für

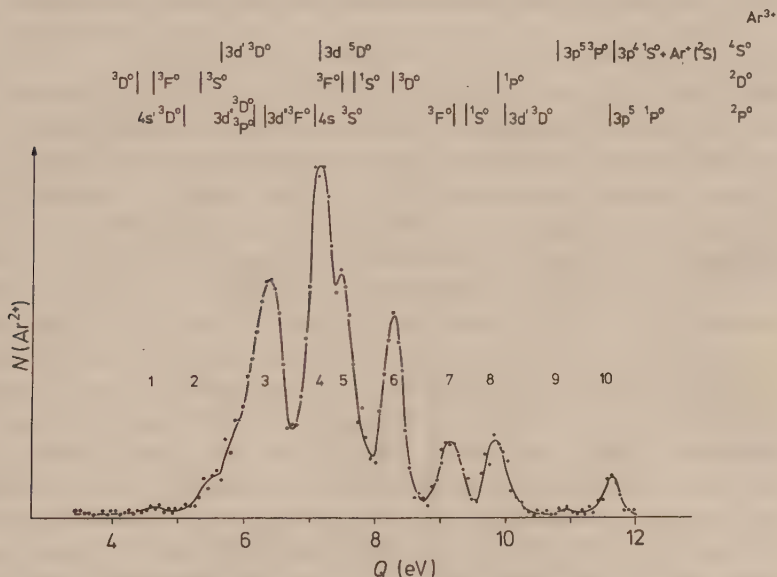
Tabelle 5.1 Reaktionskanäle für den Elektroneneinfang in Ar^{3+}/Ar -Stößen.

Peak-Nr.	Ar^{3+}	Ar^{2+}	Q/eV
1	2D°	$3\text{d } ^3\text{D}^\circ$	4.3
1	2D°	$4\text{s } ^3\text{F}^\circ$	4.6
	2P°	$4\text{s } ^3\text{S}^\circ$	5.2
	2D°	$4\text{s}' ^3\text{D}^\circ$	5.0
2	2D°	$3\text{d } ^1\text{D}^\circ$	5.3
2	4S°	$3\text{d } ^3\text{D}^\circ$	5.7
	2D°	$3\text{d}' ^1\text{G}^\circ$	5.8
	2P°	$3\text{d}'' ^3\text{P}^\circ$	5.9
3	2P°	$3\text{d } ^3\text{D}^\circ$	6.0
3	2P°	$3\text{d}'' ^3\text{F}^\circ$	6.2
	2D°	$3\text{d}' ^3\text{G}^\circ$	6.3
4	2P°	$4\text{s } ^3\text{S}^\circ$	6.9
4	2P°	$3\text{d } ^1\text{D}^\circ$	7.0
4	4S°	$3\text{d } ^5\text{D}^\circ$	7.2
5	2D°	$3\text{d}' ^3\text{F}^\circ$	7.4
5	2D°	$3\text{d}' ^1\text{S}^\circ$	7.5
5	2P°	$3\text{d}' ^1\text{G}^\circ$	7.5
	2P°	$3\text{d}' ^3\text{G}^\circ$	8.0
6	2D°	$3\text{d}' ^3\text{D}^\circ$	8.1
7	2P°	$3\text{d}' ^3\text{F}^\circ$	9.1
7	2P°	$3\text{d}' ^1\text{S}^\circ$	9.2
8	2D°	$3\text{s}3\text{p}^5 ^1\text{P}^\circ$	9.7
8	2P°	$3\text{d}' ^3\text{D}^\circ$	9.8
	2D°	$3\text{p}^4 ^1\text{S}$	10.0 (*)
9	4S°	$3\text{s}3\text{p}^5 ^3\text{P}^\circ$	10.8
	2P°	$3\text{s}3\text{p}^5 ^1\text{P}^\circ$	11.4
10	2P°	$3\text{p}^4 ^1\text{S}$	11.7 (*)

den gemessenen totalen Wirkungsquerschnitt der Umladung gilt dann:

$$\sigma_{\text{total}} = \sum_i f_i \sum_j \sigma_{ij}. \quad (5.1)$$

Über eine detaillierte Analyse des Energiegewinnspektrums werden relative Peakhöhen h_{ij} (in willkürlichen Einheiten) ermittelt.



Figur 5.1 Translationsenergiespektrum der in Ar³⁺/Ar-Stößen gebildeten Ar²⁺-Ionen (aus Huber et al. 1984). Bei den mit einem Stern gekennzeichneten Kanälen wird ein 3s-Elektron des Targets eingefangen.

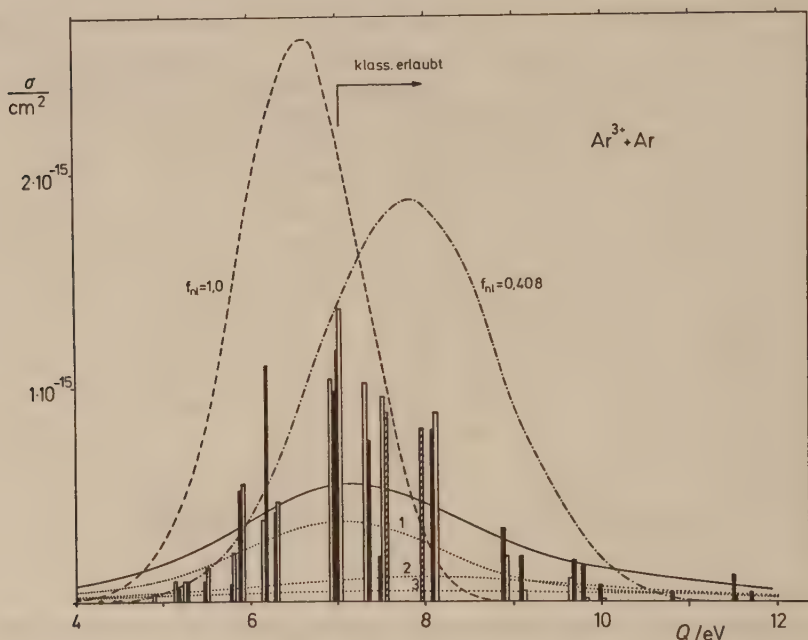
Diese Peakhöhen sind proportional zum zustandsselektiven Wirkungsquerschnitt und zum Anteil des zur Reaktion führenden elektronischen Zustands im Strahl; es gilt:

$$h_{ij} = c f_i \sigma_{ij}. \quad (5.2)$$

Durch Einsetzen dieser Gleichung in Gleichung 5.1 ergibt sich die Normierungskonstante c zu

$$c = (\sum_i \sum_j h_{ij}) / \sigma_{\text{total}} \quad (5.3)$$

Damit läßt sich nun die absolute Größe der zustandsselektiven Wirkungsquerschnitte bestimmen, sofern die Anteile der einzelnen



Figur 5.2 Vergleich der gemessenen zustandsselektiven Wirkungsquerschnitte (volle Balken) mit erweiterten MCLZ-Rechnungen (offene Balken) sowie den Reaktionsfenstern nach Kimura (---) und Taubjerg (- - - -) mit $f_{N1} = 0.408$. Die durchgezogene Kurve gibt das Reaktionsfenster nach Niehaus an, die gepunkteten Kurven 1 bis 3 stellen die Beiträge des ersten bis dritten molekularen Elektrons dar. Die Bedeutung der schraffiert gezeichneten Balken ist im Text erläutert.

elektronischen Zustände im Primärstrahl und der totale Wirkungsquerschnitt der Umladung bekannt sind. Daten für totale Wirkungsquerschnitte für die Umladung von Ar^{q+} -Ionen in Ar wurden z.B. von Salzborn (1976) gemessen. Bei einer Stoßenergie von 600 eV beträgt der Wirkungsquerschnitt $2.5 \cdot 10^{-16} \text{ cm}^2$. Die Zusammensetzung des durch Elektronenstoß erzeugten Ar^{q+} -Strahls wurde von Binder (1987) bestimmt. Bei einer Energie der ionisierenden Elektronen von 350 eV sind die Anteile der Grundzustandsionen bzw. der Ionen im ersten und zweiten metastabilen Zustand 0.30, 0.47 und 0.23.

Die ausgefüllten Balken in Figur 5.2 entsprechen den experimentell ermittelten zustandselektiven Wirkungsquerschnitten. Als erstes sollen diese mit den Vorhersagen des klassischen Modells nach Niehaus verglichen werden. Die gepunkteten Kurven 1 bis 3 stellen die Wirkungsquerschnitte für den Einfang des ersten, zweiten und dritten molekularen Elektrons dar (Die maximale Anzahl t_0 der im Stoß molekular werdenden Elektronen ist in diesem Fall gleich der Projektilladungszahl $q = 3$). Die durchgezogene Kurve ist die Summe der drei Anteile. Die Lage des Maximums der zustandselektiven Wirkungsquerschnitte bei 7 eV wird von der klassischen Rechnung gut beschrieben, die absolute Größe wird jedoch etwas unterschätzt. Die klassisch bestimmte Verteilung ist breiter als die gemessene und zeigt vor allem im Bereich kleiner Energiedefekte größere Abweichungen. Allerdings werden gerade stark exotherme Reaktionen, die über Kurvenkreuzungen bei kleinen Kernabständen ablaufen, durch die Beiträge der inneren molekularen Elektronen recht gut wiedergegeben.

Die gestrichelt gezeichnete Kurve ($f_{a1}=1.0$) ist eine Berechnung des Reaktionsfensters nach Kimura et al. Das Maximum liegt bei zu kleinen Energiegewinnen, der absolute Wert der Wirkungsquerschnitte wird einen Faktor zwei zu groß bestimmt. Bessere Übereinstimmung zeigt die gleiche Berechnung mit Berücksichtigung des Taubjerg-Faktors. Der Elektroneneinfang geschieht vorwiegend in 3d Zustände, so daß $f_{a2} = 0.408$ als Korrekturfaktor der Kopplungsstärken H_{ij} verwendet werden muß. Das so berechnete Reaktionsfenster ist durch die strichpunktierte Kurve darge-

stellt. Obwohl jetzt die absoluten Werte der Wirkungsquerschnitte mit $Q \leq 7$ eV gut wiedergegeben werden, zeigen sich im Bereich $Q > 7$ eV noch starke Abweichungen. Die Tatsache, daß die Landau-Zener Reaktionsfenster zu große Wirkungsquerschnitte liefern, ist verständlich, da sie Zwei-Zustandsnäherungen darstellen. Im Gegensatz dazu, liegt hier ein Vielkanalsystem vor, in welchem der einlaufende Teilchenfluß auf viele konkurrierende Kanäle verteilt wird.

Die offenen und schraffierten Balken sind die Ergebnisse der MCLZ-Rechnungen, die im zweiten Kapitel beschrieben wurden. Die empirischen diabatischen Faktoren b_{ij} wurden hierbei gleich 1.0 gewählt. Eine Ausnahme bilden die Kanäle mit Projektilanregung, bei denen b_{ij} gleich 0.3 gesetzt wurde (siehe hierzu Kapitel V.2.). Die Übereinstimmung der Rechnungen mit den experimentellen Werten ist gut, allerdings ergeben sich bei hohen Energiegewinnen (kleinen Kernabständen der Kurvenkreuzung) noch größere Abweichungen. Die beiden schraffierten Balken geben die Wirkungsquerschnitte für den Einfang durch $\text{Ar}^{3+} (^2P^o)$ -Projektilionen in die Zustände $3d' ^{1,3}G^o$ an. Experimentell wurden diese Kanäle nicht beobachtet. Eine Erklärung hierfür bietet die Auswahlregel der Core-Erhaltung (Huber und Kahlert 1984), Winter 1983). Rechnungen von Hansen und Persson (1986) zeigen nämlich, daß der $3d' ^{1,3}G^o$ -Zustand bezüglich der Eigenvektorzusammensetzung des Cores ein nahezu reiner Zustand ist. Im Fall von $\text{Ar}^{2+} (3s^2 3p^2 n1)$ läßt sich der Core durch

$$|3s^2 3p^2 \rangle = c_1 |^4S^o \rangle + c_2 |^2D^o \rangle + c_3 |^2P^o \rangle \quad (5.4)$$

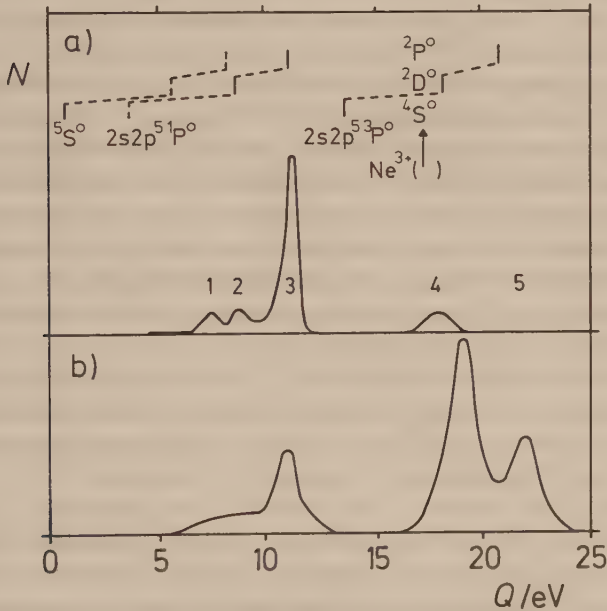
beschreiben. Die Rechnungen ergeben für den $3d' ^{1,3}G^o$ -Zustand, daß $c_2 \approx c_3 \approx 0.99$ ist und somit Beimischungen des ursprünglichen Projektilcores ($^2P^o$) vernachlässigbar klein sind.

Da der Core meistens eine Summe verschiedener Eigenvektoren ist, wird die Core-Erhaltung als Auswahlregel i.a. nicht beobachtet, in diesem Fall verhindert sie aber den Einfang des Elektrons in den $3d' ^{1,3}G^o$ Zustand durch $^2P^o$ -Projektilionen. Wird diese Auswahlregel bei den Rechnungen berücksichtigt, indem die

entsprechenden b_1 gleich null gesetzt werden, ergibt das Modell eine noch bessere Übereinstimmung mit dem Experiment.

V.2. Ne^{3+}/He : Ein-Elektroneneinfang mit Projektilanregung, Energieabhängigkeit der zustandsselektiven Wirkungsquerschnitte

Translationsenergiespektren des Ein-Elektroneneinfangs in Stößen von Ne^{3+} mit He wurde von Tunnel et al. (1987, s. auch Schmeissner et al. 1984), von Panov et al. (1987) und von uns (Lebius et al. 1989) untersucht. Alle Messungen wurden bei unterschiedlichen Stoßenergien durchgeführt, so daß sich ein Bild der Energieabhängigkeit ergibt.

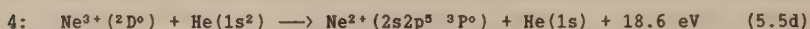
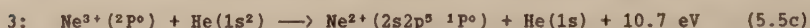
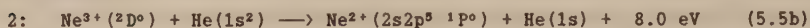


Figur 5.3 Energiegewinnspektren der durch Elektroneneinfang in Ne^{3+}/He -Stößen gebildeten Ne^{2+} -Ionen.

a) unsere Messung, $E = 600 \text{ eV}$;

b) Messung von Panov et al., $E = 5.25 \text{ keV}$.

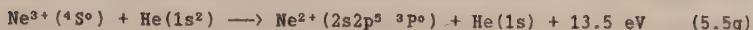
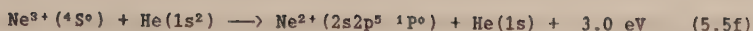
Die Translationsenergie-Spektren der Messungen sind in Figur 5.3 dargestellt. Der obere Teil (a) zeigt unsere Messung bei einer Stoßenergie von 600 eV, der untere Teil (b) gibt die Ergebnisse von Panov et al. wieder, welche bei einer Stoßenergie von 5.25 keV gemessen wurden. Die mit 1 - 5 gekennzeichneten Reaktionskanäle werden wie folgt beschrieben:



Es handelt sich also ausschließlich um Reaktionen metastabiler Projektionen. Einen zusätzlichen Beweis hierfür lieferten Experimente, bei denen die Elektronenenergie in der Ionenquelle auf Werte dicht oberhalb der Ionisierungsschwelle herabgesetzt wurde. In diesem Bereich ändert sich die Strahlzusammensetzung sehr drastisch (Lebius et al. 1989) und verändert das gemessene Translationsenergiespektrum. Wird das He-Target durch ein He/Ne-Gasgemisch ersetzt, so können die Zählraten der Reaktionskanäle im He-Target mit der Zählrate eines Reaktionskanals im Ne-Target, der durch Umladung von Ionen im Grundzustand entsteht, verglichen werden. Die gemessene Abhängigkeit von der Elektronenenergie zeigt, daß die Zuordnung der Kanäle zu metastabilen Projektionen richtig ist.

Der Reaktionskanal (5) wird bei unserer Messung nicht beobachtet; wie Figur 5.3b zeigt, steigt der Wirkungsquerschnitt für diesen Kanal bei höherer Stoßenergie offensichtlich stark an.

Bei der von Tunnel et al. und Schmeissner et al. veröffentlichten Messung wurden die gemessenen Reaktionskanäle im Energiegewinnspektrum mit dem Einfang des Elektrons durch Projektionen im Grundzustand $^4\text{S}^0$ erklärt. Der dominante Reaktionskanal besitzt einen Energiedefekt von 3.0 eV. Die Messung zeigt insgesamt zwei Reaktionskanäle, die mit den Reaktionsgleichungen



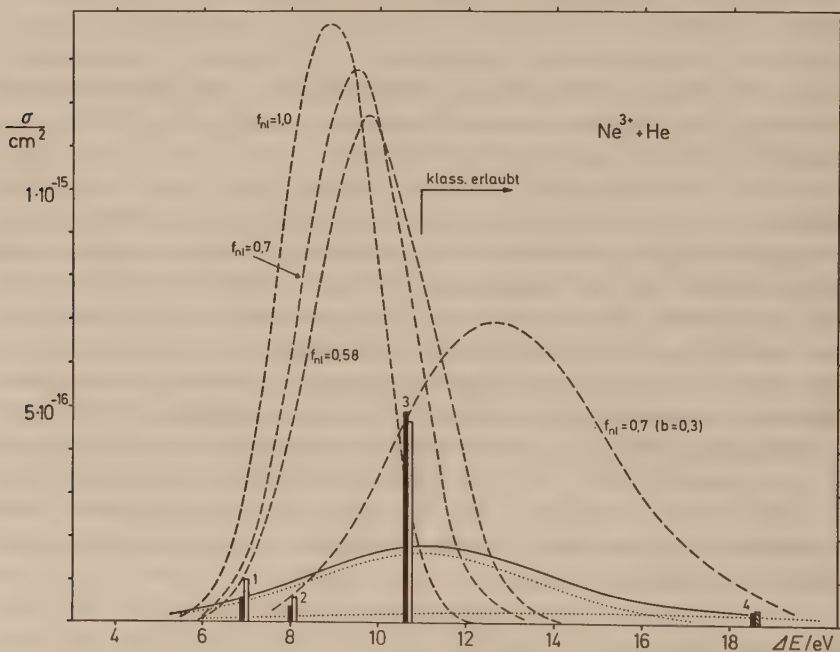
erklärt werden. Beide Reaktionskanäle werden bei den Messungen von Panov et al. und uns nicht beobachtet. Die Reaktion 5.5f besitzt einen ungünstigen Energiedefekt, da zum einen der klassisch erlaubte Bereich von Übergängen bei Energiegewinnen von mehr als 10 eV liegt (Der minimale Kernabstand der Kurvenkreuzung muß in diesem Stoßsystem kleiner als 5 a_0 sein, um den Übergang klassisch zu ermöglichen.), zum anderen handelt es sich bei der Reaktion um einen Zwei-Elektronen Prozeß, der eine größere Kopplungsstärke und deshalb eine weitere Annäherung (damit verbunden einen größeren Energiedefekt) benötigt. Desweiteren wird bei dieser Reaktion die Auswahlregel der Spinerhaltung verletzt. Der Gesamtspin im einlaufenden Kanal ist $S = 3/2$, der im auslaufenden Kanal ist nur $S = 1/2$.

Reaktion 5.5g wird ebenfalls nicht beobachtet, obwohl der Energiedefekt für diese Reaktion günstig ist. Der Gesamtspin ist auf beiden Seiten der Reaktionsgleichung gleich ($S = 3/2$), so daß eine Verletzung der Spinerhaltung nicht gegeben ist. Eine Analyse der molekularen Zustände im ein- und auslaufenden Kanal ergibt, daß die linke Seite von Gleichung 5.6g nur zu einem $^4\Sigma^-$ -Zustand koppelt. Die rechte Seite kann nur zu den molekularen $2,^4\Sigma^-$ oder $2,^4\Pi$ -Zuständen führen. Ist die Annahme der Radialkopplung gültig, so ist verständlich, daß der Übergang aufgrund der Symmetrieverletzung nicht auftritt. Bei den metastabilen Projektilen sind Kopplungen über Π - und Σ^+ -Zustände möglich, die Auswahlregeln sind hier erfüllt.

Sowohl die Messung von Panov et al. als auch unser Translationsenergie-Spektrum zeigen die Dominanz anderer Reaktionskanäle. Dieser Widerspruch läßt sich durch einen Fehler bei der Kalibrierung der Energiegewinne erklären (Cocke 1988). Für eine weitere Diskussion der Energieabhängigkeit soll diese Messung nicht herangezogen werden.

Der totale Wirkungsquerschnitt $\sigma_{\Sigma 2}$ für den Elektroneneinfang in

Ne³⁺/He-Stößen wurde durch eine Messung mit dem Gegenfeldanaly-
sator zu $2 \cdot 10^{-16}$ cm² bestimmt (s. Anhang A). Die Anteile von
Grundzustandsionen und metastabilen Ionen im primären Ionenstrahl
entsprechen bei der für die Messung eingestellten Energie der
ionisierenden Elektronen ihren statistischen Gewichten (Lebius
1988). Die relativen Besetzungen der Zustände ⁴S°, ²D° und ²P°
sind daher 0.2, 0.5 und 0.3. Mit Hilfe dieser Daten ließen sich
die zustandsselektiven Wirkungsquerschnitte bestimmen, die in
Figur 5.4 im Vergleich mit mehreren Modellen aufgetragen sind.
Die ausgefüllten Balken geben die Meßergebnisse wieder. Die

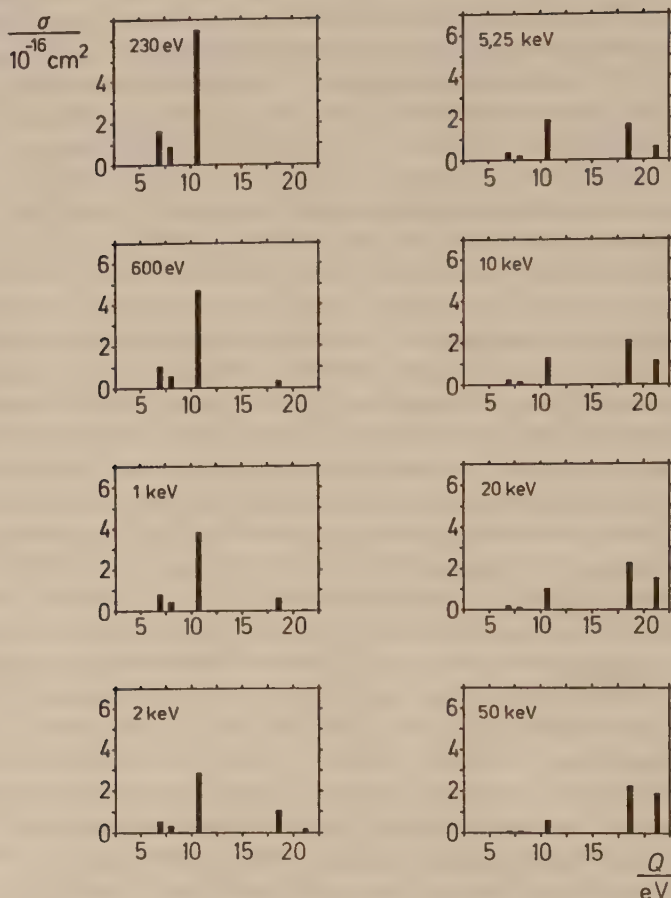


Figur 5.4 Zustandsselektive Wirkungsquerschnitte für den
Ein-Elektroneneinfang in Ne³⁺/He-Stößen mit $E = 600$ eV.
(Ausgefüllte Balken: Experiment; offene Balken: MCLZ-
Rechnung; gestrichelte Linien: Zwei-Zustands Landau-Zener
Rechnungen mit verschiedenen Werten für f_{n1} und b_{1j} ; durch-
gezogene und gepunktete Kurven: Reaktionsfenster nach dem
Niehaus-Modell)

gepunkteten Kurven sind die Reaktionsfenster nach Niehaus, die den Einfang des ersten und zweiten molekularen Elektrons des He beschreiben, die durchgezogene Kurve ist die Summe dieser Wirkungsquerschnitte. Die Verteilung ist sehr breit, die Kanäle mit sehr großen und kleinen Energiedefekten werden gut beschrieben. Die Lage des Maximums ist in Übereinstimmung mit der Messung, der Wirkungsquerschnitt für den Einfang in Kanal 3 wird aber mehr als einen Faktor 2 zu klein wiedergegeben. Die Gestrichelten Kurven zeigen Ergebnisse der Landau-Zener Rechnungen, wobei das Reaktionsfenster ohne ($f_{01} = 1.0$) und mit Berücksichtigung der Taulbjerg-Faktoren $f_{30} = 0.58$ (Einfang in das 3s-Niveau, Kanal 1) und $f_{21} = 0.7$ (Einfang in 2p) bestimmt wurde. Nur Kanal 1, der in der Flanke der entsprechenden Kurve liegt, wird gut wiedergegeben, die Rechnung für die Kanäle 2 - 4 zeigt nur eine unzureichende Übereinstimmung. Eine mögliche Erklärung hierfür ist die Tatsache, daß in diesen Reaktionen ein 2s2p⁵-Zustand des Projektils gebildet wird, d.h. zusätzlich zum Einfang des Elektrons in das 2p-Niveau wird ein 2s-Elektron angeregt. Dieser Zwei-Elektronenprozeß sollte durch eine reduzierte Kopplungsstärke beschrieben werden; die Kopplung wird erst bei kleineren Kernabständen effektiv und das Reaktionsfenster wird zu größeren Energiegewinnen hin verschoben. Eine Rechnung, bei der für die Kanäle 2 - 4 der empirische diabatische Faktor b_{1j} variiert wurde, zeigte gute Übereinstimmung, falls $b_{1j} \approx 0.3$ gewählt wurde. Der Kanal 4 mit der am weitesten innen liegenden Kurvenkreuzung wird noch zu groß berechnet. Eine Vielkanal-Rechnung (offene Balken), die die Abnahme des einlaufenden Flusses durch die weiter außen liegenden Kreuzungen berücksichtigt, ergibt eine noch bessere Übereinstimmung mit den Resultaten der Messung (auch hierbei wurde der Faktor $b_{1j} = 0.3$ für die Berechnung der Kopplungsstärken der Kanäle 2 - 4 benutzt.).

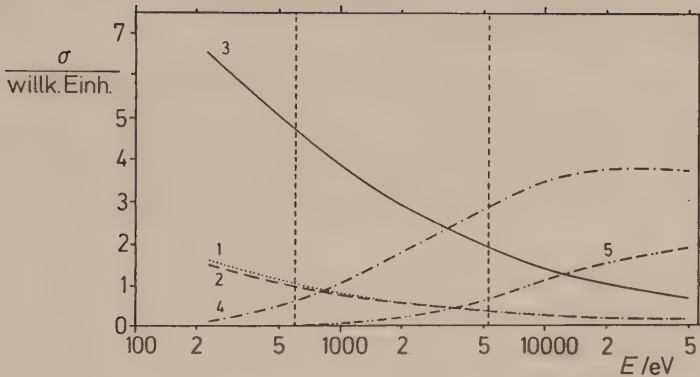
In Figur 5.5 sind die Ergebnisse der MCLZ-Rechnungen für acht verschiedene Stoßenergien dargestellt. Die Höhe der Balken gibt den absoluten zustandselektiven Wirkungsquerschnitt (ohne Berücksichtigung der Strahlzusammensetzung) an. Die experimentell gefundene Verschiebung des Reaktionsfensters mit steigender Stoß-

energie zu größeren Energiegewinnen hin, wird durch die Rechnungen bestätigt.



Figur 5.5 MCLZ-Rechnungen der zustandsselektiven Wirkungsquerschnitte für verschiedene Stoßenergien.

Zum besseren Vergleich mit den Messungen sind die zustandsselektiven Wirkungsquerschnitte in Figur 5.6 als Funktion der Stoßenergie aufgetragen. Die unterschiedlichen Anteile der verschiedenen elektronischen Zustände im primären Ionenstrahl

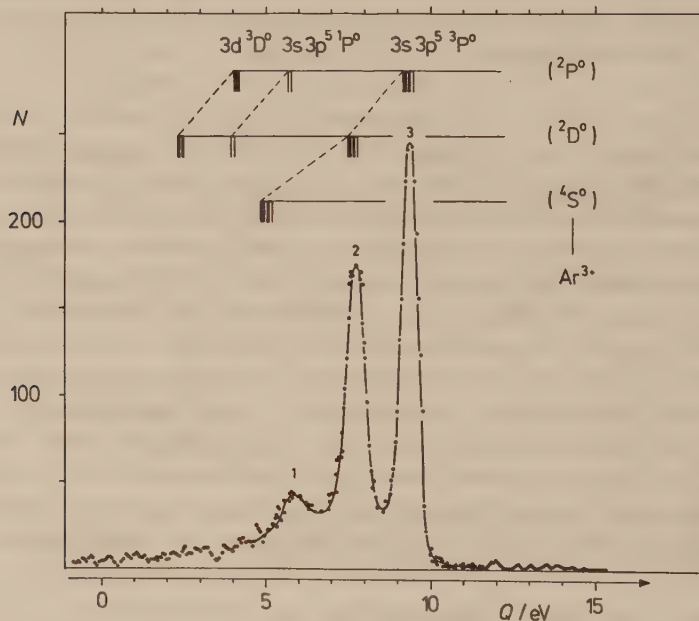


Figur 5.6 Zustandsselektive Wirkungsquerschnitte der mit 1 - 5 gekennzeichneten Reaktionskanäle als Funktion der Stoßenergie. Die senkrechten gestrichelten Linien markieren die Energien der vorliegenden Experimente (Eigene Experimente: $E = 600 \text{ eV}$; Panov et al. $E = 5.25 \text{ keV}$).

(welche als statistisch angenommen wurden) wurden hierbei berücksichtigt, d.h. die zustandsselektiven Wirkungsquerschnitte wurden im Verhältnis 5:3 gewichtet. Die senkrechten gestrichelten Linien markieren die Stoßenergien, bei denen die Messungen durchgeführt wurden. Die Anpassung des empirischen diabatischen Faktors b_{ij} wurde bei unserer Messung (600 eV) durchgeführt. Die Übereinstimmung der Rechnung mit der Messung von Panov et al. bei 5.25 keV ist gut. Im gemessenen Energiespektrum sind die Anteile der Kanäle 3 und 5 in etwa gleich groß, die Rechnung zeigt hier ein etwas abweichendes Verhältnis. Der Reaktionskanal 4, welcher bei 600 eV Stoßenergie nur eine untergeordnete Rolle spielt, wird bei steigender Energie der dominante Kanal. Auch der experimentelle Befund, daß Kanal 5 ($Q = 21.2 \text{ eV}$) erst bei höheren Stoßenergien auftritt, wird von der Rechnung gut wiedergegeben.

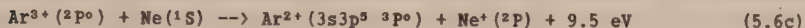
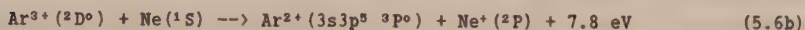
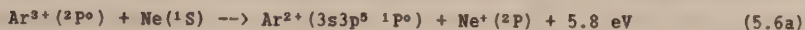
V.3. Elektroneneinfang mit Projektilanregung in Ar^{3+}/Ne -Stößen: Reduzierung der Kopplungsstärke

Die Umladung im Stoßsystem Ar^{3+}/Ne erfolgt dominant über den Prozeß des Elektroneneinfangs mit gleichzeitiger Projektilanregung, so daß wie im vorigen Abschnitt im Stoß zwei aktive Elektronen berücksichtigt werden müssen. Das Translationsenergiespektrum der durch Umladung gebildeten Ar^{2+} -Ionen ist in Figur 5.7 dargestellt (Puerta et al. 1985). Das Spektrum zeigt drei Strukturen, wobei der dominante Reaktionskanal bei einem Energiegewinn von 9.5 eV liegt. Eine Rechnung des klassischen Modells zeigt, daß der minimale Energiegewinn für dieses Stoßsystem bei 9.7 eV liegt. Da das klassische Reaktionsfenster eine Gaußverteilung um diesen Wert herum darstellt, lassen sich die relativen Höhen der drei Peaks verstehen. Die beobachteten



Figur 5.7 Energiegewinnspektrum der aus Ar^{3+}/Ne -Stößen resultierenden Ar^{2+} -Ionen. Der Einfangprozeß wird durch metastabile Projektilionen dominiert (Puerta et al. 1985).

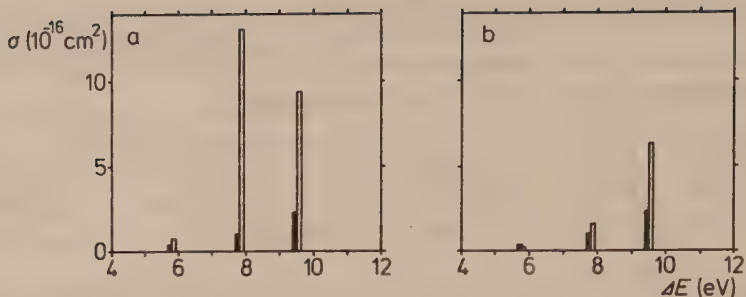
Reaktionskanäle werden durch metastabile Projektionen hervorgerufen, da im günstigen Bereich von Energiedefekten kein Reaktionskanal von Grundzustandsionen verfügbar ist. Die Reaktionskanäle werden durch die Gleichungen



beschrieben. Der Endzustand des Ar^{2+} -Ions besitzt die Elektronenkonfiguration $3s\ 3p^5$. Zur Bildung dieses Zustands muß ein $2p$ -Elektron des Ne in das $3p$ -Niveau des Ar eingefangen werden; gleichzeitig muß ein $3s$ -Elektron des Ar in den $3p$ -Zustand angeregt werden.

Der totale Umladungsquerschnitt σ_{32} für diese Reaktion ist $1.3 \cdot 10^{-16}\text{ cm}^2$ (Justiniano et al. 1981). Das Spektrum wurde bei einer Energie der ionisierenden Elektronen von 500 eV gemessen. Die Strahlanteile von Grundzustandsionen und metastabilen Ionen betragen 0.24, 0.49 und 0.27 für die Zustände $^4\text{S}^o$, $^2\text{P}^o$ und $^2\text{D}^o$ (Binder 1987). Die zustandsselektiven Wirkungsquerschnitte für die Reaktionskanäle 5.6 a-c bestimmen sich daraus zu $0.4 \cdot 10^{-16}\text{ cm}^2$, $1.0 \cdot 10^{-16}\text{ cm}^2$ und $2.3 \cdot 10^{-16}\text{ cm}^2$.

In Figur 5.8 sind die gemessenen zustandsselektiven Wirkungsquerschnitte (ausgefüllte Balken) im Vergleich mit den aus MCLZ-Rechnungen bestimmten Wirkungsquerschnitten (offene Balken) aufgetragen. In Teil a) wurden nur der Taubjerg-Faktor f_{31} bei der Bestimmung der Elemente der Kopplungsmatrix H_{31} berücksichtigt. Die Übereinstimmung mit der Messung ist schlecht. Die Rechnung überschätzt den absoluten Wert der Wirkungsquerschnitte und ergibt eine falsche Lage für das Maximum des Reaktionsfensters. In Teil b) wurden die Kopplungselemente wie im zuvor besprochenen System mit dem empirischen diabatischen Faktor b_{31} korrigiert. Der Faktor b_{31} wurde gleich 0.3 gesetzt, d.h. die Kopplung wurde um den Faktor 3 reduziert. Der Wert von 0.3 wurde durch Anpassung der Kopplungsstärke für diesen Prozeß im Stoßsystem Ne^{3+}/He (vgl. vorhergehendes Kapitel) bestimmt, stellt



Figur 5.8 Zustandsselektive Wirkungsquerschnitte für den Elektroneneinfang in Ar^{3+}/Ne -Stößen bei $E = 600 \text{ eV}$ (ausgefüllte Balken: experimentelle Ergebnisse; offene Balken: MCLZ-Rechnungen)

a) unter Berücksichtigung des Taulbjerg-Faktors f_{31} ,

b) zusätzlich mit dem empirischen diabatischen Faktor $b_{1j} = 0.3$.

also keinen Fit an die Daten dieses Systems dar! Die Ergebnisse der Rechnung stimmen viel besser als vorher mit den gemessenen Daten überein. Die relative Höhe der drei Kanäle wird besser wiedergegeben, die absoluten Werte weichen allerdings bis zu einem Faktor zwei ab, was im Rahmen der Meßgenauigkeit der zustandsselektiven Wirkungsquerschnitte sowie der Genauigkeit des Landau-Zener Modells liegt.

VI. ZUSAMMENFASSUNG

In der vorliegenden Arbeit wird der Prozeß des Elektroneneinfangs in langsamen Stößen mehrfach geladener Ionen mit Atomen behandelt, wobei ein besonderes Gewicht auf die Untersuchung von Mehrelektronenprozessen gelegt wird. Die Mechanismen dieser Prozesse und die Möglichkeit einer realistischen Beschreibung waren vor Durchführung dieser Experimente noch weitgehend ungeklärt.

Die Experimente wurden mit Hilfe der Translationsenergie-Spektroskopie durchgeführt. Zum einen wurde die Winkelverteilung der umgeladenen Ionen für einzelne Reaktionskanäle untersucht. Hierfür wurde eine vorhandene Apparatur zur Messung von Translationsenergiespektren umgeladener Ionen erweitert, so daß Messungen in Abhängigkeit vom Streuwinkel durchgeführt werden konnten. Ein anderer Teil dieser Arbeit ist der Untersuchung von Zwei-Elektronenprozessen beim Ein-Elektroneneinfang und die Beschreibung dieser Prozesse mit einfachen Modellen gewidmet.

Die Messung der differentieller Wirkungsquerschnitte ($d^2\sigma/dE d\theta$) wurde sowohl für den Prozeß des Ein-Elektroneneinfangs als auch für den Transfer von zwei Elektronen an verschiedenen Systemen durchgeführt. Im Stoßsystem Ar^{2+}/He konnten infolge der hohen erzielten Winkel- und Energieauflösung Strukturen im differentiellen Wirkungsquerschnitt für einzelne Kanäle nachgewiesen und als Stueckelberg-Oszillationen identifiziert werden. Diese Oszillationen wurden zum erstenmal für den Elektroneneinfang in mehrfach geladene Ionen nachgewiesen. Der Vergleich mit semiklassischen Rechnungen der differentiellen Wirkungsquerschnitte zeigt eine gute Übereinstimmung.

Im Falle des Zwei-Elektroneneinfangs ist seit langem eine zentrale Fragestellung, ob dieser Prozeß durch den gleichzeitigen Übergang von zwei Elektronen an einer Potentialkurvenkreuzung, oder durch den stufenweisen Übergang von jeweils einem Elektron an verschiedenen Kurvenkreuzungen abläuft. Die Messung der differentiellen Wirkungsquerschnitte mit einem Gegenfeld-

analysatorsystem zeigen anhand des Vergleiches mit semiklassischen Rechnungen, daß in Abhängigkeit vom untersuchten Stoßsystem beide Prozesse zum Zwei-Elektroneneinfang beitragen, wobei jedoch dem Stufenprozeß in den hier untersuchten Stoßsystemen eine größere Bedeutung zukommt. Eine verallgemeinerte Diskussion der Wirkungsquerschnitte dieser Prozesse mit Hilfe von Landau-Zener Rechnungen zeigt die Abhängigkeit beider Prozesse von der relativen Lage der zum Ein- und Zwei-Elektroneneinfang gehörenden Kurvenkreuzungen. Bei den typischen Verhältnissen in Stößen mehrfach geladener Ionen mit Atomen ergibt sich hieraus eine Begünstigung des Stufenprozesses, was in Übereinstimmung mit der experimentellen Beobachtung ist.

Die Beschreibung von Ein-Elektronenprozessen ist weitgehend verstanden, im Gegensatz dazu gibt es bei der Beschreibung von Mehrelektronenprozessen noch viele Unklarheiten. Die Ergebnisse der experimentellen Untersuchungen an einigen Stoßsystemen ließen sich nicht im Rahmen des klassischen Modells bzw. mit Hilfe der Landau-Zener Rechnungen beschreiben. Eine Analyse zeigt, daß Abweichungen zu den Vorhersagen der einfachen Modelle dann auftreten, wenn der Elektroneneinfang mit Projektilanregung (also ein Zwei-Elektronenprozeß) verbunden ist, oder wenn Systeme mit vielen konkurrierenden Ein- und Ausgangskanälen vorliegen.

Um diese Fragen genauer zu untersuchen, wurden einerseits spezielle Systeme im Experiment betrachtet. Andererseits wurden erweiterte MCLZ-Rechnungen entwickelt, die nicht nur mehrere Ausgangskanäle (wie die bisherigen MCLZ-Rechnungen) enthalten, sondern die auch die Konkurrenz der unterschiedlichen Eingangskanäle berücksichtigen. Die Kopplungselemente H_{ij} nach Olson und Salop wurden um einen empirischen diabatischen Faktor b_{ij} ergänzt, der zum einen hilft, die Auswahlregeln zu erfüllen, zum anderen kann mit diesem Faktor die Kopplungsstärke der Zwei-Elektronenprozesse reduziert werden.

Die erweiterten MCLZ-Rechnungen, die diese Änderungen beinhalten, geben gute Übereinstimmung mit den Experimenten. Insbesondere ergibt ein Vergleich der experimentellen Ergebnisse mit den

Modellrechnungen, daß sich Projektilanregungsprozesse, bei denen neben dem eingefangenen Elektron ein zweites Elektron vom ns-Niveau in die np-Schale angeregt wird, mit einer um den Faktor 3 verringerten Kopplungsstärke (d.h. $b_{ij} = 0.3$) gut beschreiben lassen. Weitere Untersuchungen zeigen, daß die mit erweiterten MCLZ-Rechnungen bestimmte Energieabhängigkeit der zustandsselektiven Wirkungsquerschnitte in guter Obereinstimmung mit den experimentellen Ergebnissen ist.

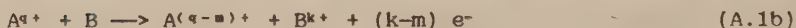
ANHANG

A. Messung totaler Wirkungsquerschnitte von Umladungsreaktionen

Der totale Wirkungsquerschnitt $\sigma_{q, q-m}$ eines Umladungsprozesses der Form



oder



ist ein Maß dafür, wieviele der Ar^{q+} -Ionen beim Stoß mit Atomen B des Targets genau m Elektronen einfangen. Falls die Messung ohne Koinzidenz mit den gebildeten Targetionen durchgeführt wird, läßt sich nicht entscheiden, ob der reine Elektroneneinfang nach Gleichung A.1a oder der Prozeß der Transferionisation nach Gleichung A.1b vorliegt. Der so bestimmte Wirkungsquerschnitt ist die Summe der Wirkungsquerschnitte der beiden Prozesse.

Zwischen der Zählrate $(dN/dt)_{q-m}$ der umgeladenen Ionen und der Zählrate $(dN/dt)_q$ der primären Ionen besteht der Zusammenhang

$$(dN/dt)_{q-m} = (dN/dt)_q * (1 - \exp\{-n \sigma_{q, q-m}\}). \quad (A.2)$$

Die Größe n ist die Targetdicke, das Produkt aus der Anzahldicke der Targetatome und der Länge des Targets. Da die Länge eines Gastargets im allgemeinen nicht gut definiert ist (überströmendes Gas an der Ein- und Ausgangsblende der Targetgaszelle) und die Dichte noch vom Ort abhängen kann, gilt für die Targetdicke die Beziehung

$$n = \int n(l) dl, \quad (A.3)$$

wobei die Integration über den ganzen Bereich, in dem Umladungsprozesse auftreten, ausgeführt werden muß. Eine experimentelle Bestimmung der Dichte der Targetatome ist sehr aufwendig. Unter

Annahme einer konstanten Dichte kann die Targetdicke durch

$$n = n_{eff} \quad (A.4)$$

angenähert werden, indem eine effektive Länge des Targets bestimmt wird. Diese effektive Länge ergibt sich aus der Geometrie des Stoßbereiches anhand von Rechnungen der Diffusion des Gases in den Außenraum (Toburen und Nakai 1969).

Eine experimentelle Methode, die Targetdicke zu bestimmen, ist die Kalibrierung anhand einer Umladungsreaktion mit gut bekanntem Wirkungsquerschnitt. Mit Hilfe des Gegenfeldanalysators lassen sich die Zählraten der primären und der umgeladenen Ionen für einen festgelegten Targetgasdruck bestimmen. Diese Zählraten müssen als Funktion des Streuwinkels bestimmt werden (für Messungen totaler Wirkungsquerschnitte ist ein möglichst großer Akzeptanzwinkel des Nachweissystems anzustreben, s. auch Olson und Kimura 1982). Die gemessenen Winkelverteilungen $(dN/df)_{q-m}(\theta)$ sind proportional zum raumwinkeldifferentiellen Wirkungsquerschnitt und müssen über den Raumwinkel integriert werden

$$(dN/df)_{q-m} = \int (dN/df)_{q-m}(\theta) \sin\theta \, d\theta \, d\phi. \quad (A.5)$$

Das Verhältnis der Primärstrahlzählraten und den Zählraten der umgeladenen Ionen hängt nur noch von der Targetdicke n ab. Für die Bestimmung von Umladungsquerschnitten, insbesondere bei der Umladung von mehreren Elektronen, muß der Targetgasdruck so niedrig gewählt werden, daß die Einzelstoßbedingung

$$n \sigma_{q, q-m} \ll 1 \quad (A.6)$$

erfüllt ist. Experimentell läßt sich das mit der sogenannten Druckanstiegsmethode überprüfen. Die Zählraten $(dN/df)_{q-m}$ müssen eine lineare Abhängigkeit vom Targetgasdruck zeigen, im anderen Fall liegen mehrfache Stöße vor, was vor allem beim Mehr-Elektronentransfer zu falschen Ergebnissen führt. Wenn die Einzelstoßbedingung erfüllt ist, läßt sich Gleichung A.2 entwickeln. Die Targetdicke ergibt sich damit aus dem Verhältnis

der Zählraten der umgeladenen und primären Ionen zu

$$\pi = (dN/dt)_{q-m} / [(dN/dt)_q \sigma_{q,q-m}]. \quad (A.7)$$

Bei bekanntem $\sigma_{q,q-m}$ ist hiermit die Targetdicke für ein bestimmtes Targetgas bestimmt und Umladungsquerschnitte für andere Ionen oder Ladungszustände können gemessen werden. Zum Beispiel wurden die Wirkungsquerschnitte $\sigma_{3,2}$ für die Umladung von Ne^{3+} -Ionen in He und Ne mit dieser Methode bei einer Stoßenergie von 600 eV bestimmt. Für das He-Target war der Wirkungsquerschnitt $\sigma_{2,1}$ für die Reaktion $Ne^{2+} + He \rightarrow Ne^+ + He^+$ zu $\sigma_{2,1} = 1.4 \cdot 10^{-17} \text{ cm}^2$ bekannt (eine Datensammlung gemessener und berechneter Wirkungsquerschnitte für die Umladung in He findet sich z.B. bei Wu et al. 1988a und 1988b); für das Ne-Target wurde der Wirkungsquerschnitt $\sigma_{3,2}$ der Umladung von Ar^{3+} -Ionen zur Kalibrierung benutzt (Justiniano et al. 1981). Die Ergebnisse für die Wirkungsquerschnitte bei einer Stoßenergie von 600 eV sind:

$$\sigma_{3,2}(Ne^{3+}/He) = 2.0 \cdot 10^{-16} \text{ cm}^2 \quad (A.8a)$$

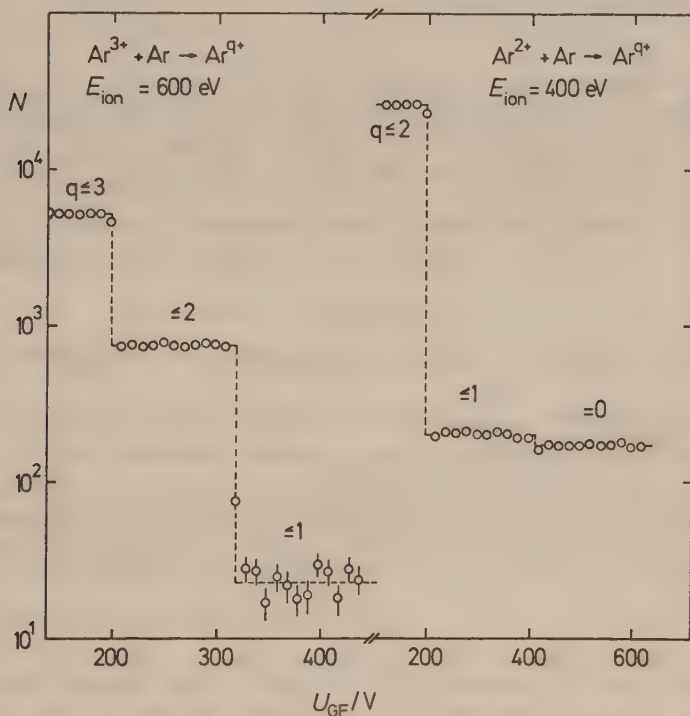
und

$$\sigma_{3,2}(Ne^{3+}/Ne) = 1.6 \cdot 10^{-16} \text{ cm}^2. \quad (A.8b)$$

Die Meßfehler des Targetgasdruckes und Ungenauigkeiten durch die Statistik der Zählrate liegen insgesamt unter 10%, die Genauigkeit der bestimmten Wirkungsquerschnitte hängt im wesentlichen von der Genauigkeit des zur Targetdickenkalibrierung benutzten Wertes ab.

B. Nachweiswahrscheinlichkeit eines Channeltrons für neutrale Teilchen

In Figur A.1 sind die Ladungszustandsverteilungen nach dem Stoß von Ar^{3+} - und Ar^{2+} -Ionen mit Ar dargestellt. Die Ionen in niedrigeren Ladungszuständen werden durch Umladung gebildet. Beim Ar^{3+} sind die zu verschiedenen Ladungszuständen gehörenden Stufen klar voneinander getrennt. Bei der Umladung von Ar^{2+} liegt das



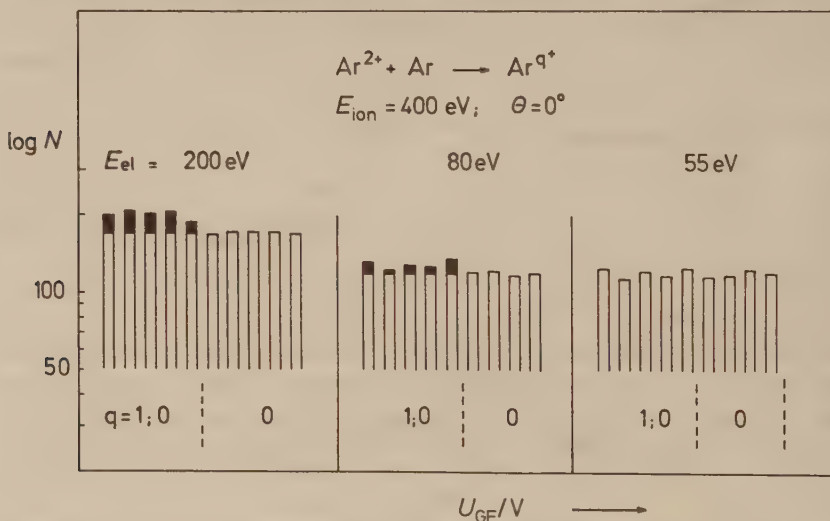
Figur A.1 Gegenfeldmessungen der Ladungszustände, welche in Ar^{3+}/Ar und Ar^{2+}/Ar -Stößen gebildet wurden ($\theta = 0^\circ$).

zu einfach geladenen Ar^+ -Ionen und neutralisierten Ar-Atomen gehörende Zählratenplateau nur wenig oberhalb der Zählrate neutraler Argonatome (nur Neutralteilchen können bei Gegenfeld-

spannungen von $U_F > 400$ V nachgewiesen werden, da die Energie der primären Ar^{2+} -Ionen 400 eV beträgt).

Der Ein-Elektroneneinfang von Ar^{2+} in Ar besitzt einen sehr kleinen Wirkungsquerschnitt, da Kurvenkreuzungen im günstigen Kernabstandsbereich nur für hochangeregte metastabile Projektilionen ($^5\text{D}_4^\circ$ und $^3\text{F}_4^\circ$) vorliegen, welche nur in geringem Maße ($< 1\%$) im Strahl vorhanden sind (s. Wiesemann et al. 1987). Eine Diskussion des Elektroneneinfangs in Ar^{2+} /Ar-Stößen findet sich bei Puerta und Huber (1985).

Der Wirkungsquerschnitt für die Neutralisierung der Ar^{2+} -Ionen durch Zwei-Elektroneneinfang in Ar ist erheblich größer ($\sigma_{2,0} = 9 \cdot 10^{-16} \text{ cm}^2$, Cosby und Moran 1972; dagegen ist $\sigma_{2,1} \approx 10^{-17} \text{ cm}^2$, stark abhängig von der Konzentration hoch angeregter



Figur A.2 Gegenfeldmessungen der sekundären Ar^+ -Ionen und Ar-Atome nach Elektroneneinfang in Ar^{2+} /Ar-Stößen mit $E = 400$ eV. Die Messungen sind bei verschiedenen Elektronenenergien entstanden. Nur die schwarz ausgefüllten Teile der Balken sind die Zählrate von Ar^+ -Ionen, die offenen Teile stellen die Zählrate der neutralen Ar-Atome dar.

metastabiler Ionen im Strahl). Die Gegenfeldmessung zeigt also, daß die neutralen Ar-Atome bei einer Energie von $E = 400$ eV noch deutlich nachgewiesen werden können. In Figur A.2 ist die Stufe im Gegenfeldspektrum noch einmal deutlicher dargestellt, die Messungen sind bei unterschiedlichen Elektronenenergien in der Ionenquelle aufgenommen. Der Anteil der hoch angeregten metastabilen Ionen steigt mit wachsender Elektronenenergie, bei 55 eV können diese Ionen nicht mehr erzeugt werden, da die Schwellenenergie 61.3 eV beträgt. Nur die ausgefüllten Teile der Balken sind der Anteil von Ar^+ -Ionen an der nachgewiesenen Zählrate, der Rest entsteht durch neutrale Ar-Atome.

Zur Bestimmung der Nachweiswahrscheinlichkeit für die neutralisierten Ionen muß außer dem Wirkungsquerschnitt auch die Targetdicke bekannt sein (vgl. Anhang A.). Die Targetdicke konnte mit den bekannten Wirkungsquerschnitten der Reaktionen $\text{Ar}^{3+} + \text{Ar} \rightarrow \text{Ar}^{2+,+} + \text{Ar}^{+,2+}$ (Salzborn 1976) kalibriert werden. Aus der primären Zählrate ergibt sich für die Zählrate der neutrale Atome:

$$(dN/dt)(\text{Ar}^0) = (dN/dt)(\text{Ar}^{2+}) \pi \alpha_{z.o.} \quad (\text{A.9})$$

Die Messung liefert eine kleinere Zählrate $(dN/dt)_{\text{mess}}$, welche das Produkt aus der theoretisch zu erwartenden Zählrate nach Gleichung A.9 und der Nachweiswahrscheinlichkeit β ist. Die Nachweiswahrscheinlichkeit des Channeltrons für Neutralteilchen konnte damit zu

$$\beta = 0.05 (\pm 0.02) \text{ bei } E = 400 \text{ eV} \quad (\text{A.10})$$

bestimmt werden. Der Wert ist vergleichbar mit der Nachweiswahrscheinlichkeit für Photonen derselben Energie (0.06, Valvo Datenbuch 1985).

REFERENZEN

- Anderson D., McCullen J., Scully M.O. and Seeby J.F. (1976) Opt. Commun. 17 227
- Andersson L.R. and Barany A. (1987) Abstracts of Contributed Papers XV.ICPEAC Brighton 546
- Barany A., Astner G., Cederquist H., Danared H., Hultdt S., Hvelplund P., Johnson A., Knudsen H., Lilieby L. and Rensfelt K.G. (1985) Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B9 397
- Bashkin S. und Stoner J.O. Jr. (1978) "Atomic Energy Levels and Grotrian Diagrams" Bd. 1 & 2 (North-Holland, Amsterdam)
- Binder J. (1987) Diplomarbeit, Bochum
- Binder J., Koslowski H.R., Huber B.A. und Wieseemann K. (1987) J. Phys. B: At. Mol. Phys. 20 2713
- Bohr N. und Lindhard J. (1954) K. Dan. Vidensk. Selsk. Mat. Fys. Medd. 28 1
- Born M. und Oppenheimer J.R. (1932) Ann. d. Physik 84 457
- Burgdörfer J. (1983) Z. Phys. A 309 285
- Chibisov M.I. und Janev R.K. (1988) Phys. Rep. 166 1
- Cocke C.L. (1988) private Mitteilung
- Cosby P.C. und Moran T.F. (1972) J. Chem. Phys. 57 3569
- Danared H. and Barany A. (1986) J. Phys. B: At. Mol. Phys. 19 3109
- Demkov Y.N. (1964) Sov. Phys. JETP 18 138
- Donné A.J.H. und de Heer F.J. (1987) Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B23 219
- Goldstein H. (1981) "Klassische Mechanik" (Akademische Verlagsgesellschaft, Wiesbaden)
- Hansen J. und Persson W. (1986) J. Phys. B: At. Mol. Phys. 19 L367
- de Heer F.J. (1980) in: "Atomic and Molecular Processes in Controlled Fusion", Hergs. McDowell M.R.C. und Ferendeci A.M. (Plenum Press, New York) S. 351
- Herzberg G. (1950) "Spectra of Diatomic Molecules" (van Nostrand Reinhold, Cincinnati) S.315f
- Hird B. und Ali S.P. (1981) J. Phys. B: At. Mol. Phys. 14 267
- Huber B.A. (1976) Dissertation, Bochum
- Huber B.A. (1987) Comments At. Mol. Phys. 21 15-39
- Huber B.A. und Kahlert H.-J. (1983) J. Phys. B: At. Mol. Phys. 16 4655

- Huber B.A. und Kahlert H.-J. (1984) J. Phys. B: At. Mol. Phys. 17 L69
- Huber B.A., Kahlert H.-J. und Wiesemann K. (1984) J. Phys. B: At. Mol. Phys. 17 2883
- Hvelplund P., Andersen L.H., Barany A., Cederquist H., Heinemeier H., Knudsen H., MacAdam K.B., Nielsen E.H. and Sorensen J. (1985) Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B9 421
- Hvelplund P. and Pederson J.O.K. (1987) Abstracts of Contributed Papers XV.ICPEAC Brighton 545
- Janev R.K. (1976) Adv. At. Mol. Phys. 12 1
- Janev R.K. und Presnyakov L.P. (1981) Phys. Rep. 70 1
- Janev R.K., Presnyakov L.P. und Shevelko V.P. (1985) "Physics of Highly Charged Ions" (Springer, Berlin) S. 209f
- Jellen-Wutte U., Schweinzer J., Vanek W. and Winter H. (1985) J. Phys. B: At. Mol. Phys. 18 L779
- Johnson R.E. (1982) "Introduction to Atomic and Molecular Collisions" (Plenum, New York)
- Justiniano E., Cocke C.L., Gray T.J., Du Bois R.D. and Can C. (1981) Phys. Rev. A 24 2953
- Kahlert H.-J. (1983) Dissertation, Bochum
- Kahlert H.-J., Wiesemann K. und Huber B.A. (1985) Ann. Phys. Lpz. 42 133
- Kimura M., Iwai T., Kaneko Y., Kobayashi N., Matsumoto A., Othani S., Okuno K., Takagi S., Tawara H. und Tsurubuchi S. (1984) J.Phys.Soc.Japan 53 2224
- Koslowski H.R. (1984) Diplomarbeit, Bochum
- Koslowski H.R., Huber B.A. und Staemmler V. (1988) J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 21 2923
- Koslowski H.R., Lebius H. und Huber B.A. (1989) Springer Tracts, im Druck
- Landau L.D. (1932) Phys. Z. Sowietunion 2 46
- Landau L.D. and Lifschitz E.M. (1969) "Lehrbuch der Theoretischen Physik" Bd.1 (Akademie-Verlag, Berlin) S. 59
- Laurent H., Barat M., Gaboriand M.N., Guillemot L. und Roncin P. (1987) J. Phys. B: At. Mol. Phys. 20 6581
- Lebius H. (1988) Diplomarbeit, Bochum
- Lebius H., Koslowski H.R. und Huber B.A. (1989) Z. Phys. D, im Druck
- Lennon M., McCullough R.W. und Gillbody H.B. (1983) J. Phys. B: At. Mol. Phys. 16 2191

- Lorents D.C. und Aberth W. (1965) Phys. Rev. 139 A1017
- Mann R., Folkmann F. und Beyer H.F. (1981) J. Phys. B: At. Mol. Phys. 14 1161
- Mann R. und Schulte H. (1987) Z. Phys. D 4 343
- McCoullogh R.W., Wilson S.M. und Gillbody H.B. (1987) J. Phys. B: At. Mol. Phys. 20 2031
- Moore C.E. (1970) "Ionization Potentials and Ionization Limits Derived From the Analysis of Optical Spectra" NSDRS-NBS 34, Washington
- Moore C.E. (1971) 'Atomic Energy Levels', NSRDS-NBS 35, NBS Circular 467, Washington
- Nakamura T., Kobayashi N. und Kaneko Y. (1985) J. Phys. Soc. Jpn. 54 2774
- v. Neumann J. und Wigner E. (1929) Z. Physik 30 467
- Niehaus A. (1980) Comments At. Mol. Phys. 9 153
- Niehaus A. (1986) J. Phys. B: At. Mol. Phys. 19 2925
- Nikitin E.E. und Umanskii S.Y. (1985) "Theory of Slow Atomic Collisions" (Springer, Berlin)
- Olson R.E. und Kimura M. (1982) J. Phys. B: At. Mol. Phys. 15 4231
- Olson R.E. und Salop A. (1976) Phys. Rev. A 14 579
- Olson R.E. und Salop A. (1977) Phys. Rev. A 16 531
- Olson R.E. und Smith F.T. (1971) Phys. Rev. A 3 1607
- Panov M.N., Basalaeu A.A. und Lozhkin K.O. (1987) "Fiz. Elektr. Atom. Stolknovenie" (Leningrad) S. 125
- Puerta J. und Huber B.A. (1985) J. Phys. B: At. Mol. Phys. 18 4445
- Puerta J., Kahlert H.-J., Koslowski H.R. und Huber B.A. (1985) Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B9 415
- Roncin P., Barat M. und Laurent H. (1986) Europhys. Lett. 2 371
- Ryufuku H., Sasaki K. und Watanabe T. (1980) Phys. Rev. A 21 745
- Salop A. und Olson R.E. (1976) Phys. Rev. A 13 1312
- Salzborn E. (1976) IEEE, Vol. NS-23, No.2
- Schmeissner C., Cocke C.L., Mann R. und Meyerhof W. (1984) Phys. Rev. A 30 1661
- Smith F.T. (1965) J. Chem. Phys. 42 2419
- Smith F.T. (1966) Phys. Rev. 150 79

- Stolterfoht N., Havener C.C., Phaneuf R.A., Swenson J.K., Shafroth S.M. und Meyer F.W. (1986) Phys. Rev. Lett. 57 74
- Stueckelberg E.C.G. (1932) Helv. Physica Acta 5 369
- Tanis J.A. et al. (1985) Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B10/11 128
- Taulbjerg K. (1986) J.Phys.B 19 L367
- Toburen L.H. und Nakai M.Y. (1969) Phys. Rev. 177 191
- Tunnel L.N., Cocke C.L., Giese J.P., Kamber E.Y., Varghese S.L. und Wagoner W. (1987) Phys. Rev. A 35 3299
- Valvo (1985) "Fotovervielfacher, Elektronenvervielfacher-Einzelkanäle, -Vielkanalplatten" Datenbuch
- Wiesemann K., Puerta J. und Huber B.A. (1987) J. Phys. B: At. Mol. Phys. 20 587
- Winter H. (1983) Physica Scripta T3 159
- Wu W.K., Huber B.A. und Wiesemann K. (1988a) ADNDT 40 57
- Wu W.K., Huber B.A. und Wiesemann K. (1988b) ADNDT 40 im Druck
- Zener C (1932) Proc. Roy. Soc. A137 696

Ich danke Herrn Prof. B.A. Huber für die intensive Betreuung und unermüdliche Unterstützung.

Herrn Prof. V. Staemmler gilt mein Dank für die Berechnung der Potentialkurven des Ar^{2+}/He -Systems.

Herrn Dipl.-Phys. J. Binder danke ich für die Hilfe beim Aufbau des Experiments und Herrn Dipl.-Phys. H. Lebius für gute Ratschläge zur rekursiven Programmierung.

Den Mitarbeitern der Feinmechanischen Werkstatt danke ich für die Anfertigung der Teile der Apparatur, Herrn O. Ernst für die Wartung des Experiments und Herrn A. Wibbe für das Anfertigen der Tuschezeichnungen.

Herrn Prof. K. Wiesemann danke ich für kritische Diskussionen.

Lebenslauf

Name: Hans Rudolf Koslowski

Geburtstag: 31.12.1960

Geburtsort: Homberg/Niederrhein

Staatsangehörigkeit: deutsch

Schulausbildung: 1967-1971 Grundschule in Castrop-Rauxel
1971-1980 Adalbert-Stifter-Gymnasium in
Castrop-Rauxel
Abiturprüfung am 23.Mai 1980

Studium: 1980-1985 Studium der Physik an der
Ruhr-Universität, Bochum
Diplomprüfung im Februar 1985

berufliche Tätigkeit: seit April 1985 wissenschaftlicher
Mitarbeiter am Institut für
Experimentalphysik, Arbeitsgruppe II

